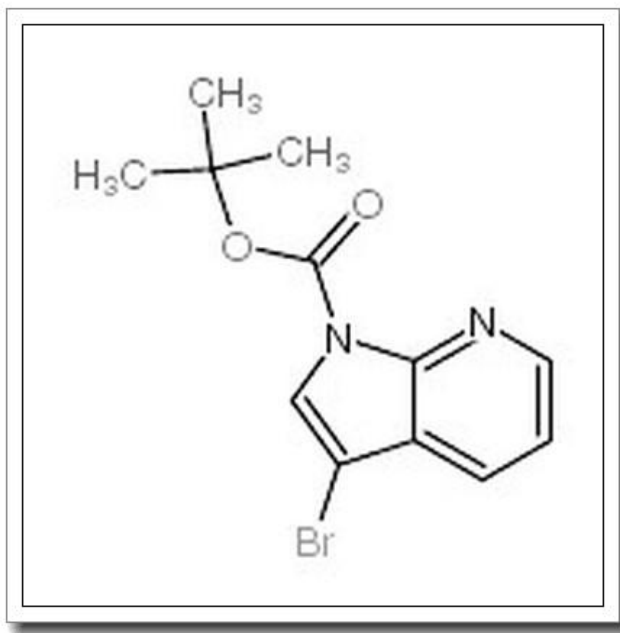


1-BOC-3-溴-7-氮杂吲哚

tert-butyl 3-bromopyrrolo[2,3-b]pyridine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl 3-bromopyrrolo[2,3-b]pyridine-1-carboxylate</i>
中文名称	1-BOC-3-溴-7-氮杂吲哚
CAS 号	226085-17-2
分子式	C ₁₂ H ₁₃ BrN ₂ O ₂
分子量	297.148
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为 1-BOC-3-溴-7-氮杂吲哚 (tert-butyl 3-bromopyrrolo[2,3-b]pyridine-1-carboxylate), CAS 号 226085-17-2, 分子式 C₁₂H₁₃BrN₂O₂, 分子量 297.148, 是一种高纯度 (>96%) 的氮杂吲哚衍生物。其结构特征为吡咯并[2,3-b]吡啶骨架, 3 位溴原子提供亲电反应位点, 1 位 BOC 保护基 (叔丁氧羰基) 赋予其良好的稳定性与溶解性。该化合物常温下为白色至类白色结晶粉末, 易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 需避光保存以避免光敏反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为 7-氮杂吲哚类化合物的关键中间体, 其溴原子可通过偶联反应 (如 Suzuki、Buchwald-Hartwig) 引入芳基或杂环基团, BOC 基团则可通过酸解离释放游离氨基, 进一步参与缩合或修饰反应。此类结构广泛存在于药物活性分子中, 尤其在激酶抑制剂、抗肿瘤及抗病毒药物研发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药和有机合成领域:

- (1) 药物研发: 作为核心骨架用于构建 EGFR、ALK 等激酶抑制剂的先导化合物;
- (2) 材料科学: 合成光电功能材料的中间体;
- (3) 学术研究: 用于探索氮杂环化合物的结构与活性关系 (SAR)。

4. 储存条件与使用建议

推荐储存于 -20° C、惰性气体 (如氩气) 保护的密闭容器中, 避免与强酸、强氧化剂接触。使用前需恢复至室温并干燥处理, 建议在通风橱中操作。溶解性测试表明, 其在 DMF 中的溶解度可达 50 mg/mL。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 验证纯度 >96%, 残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据:

- (1) GHS 危害标识: H315 (皮肤刺激)、H319 (眼刺激)、H335 (呼吸道刺激);

- (2) 防护措施: 佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套;
- (3) 应急处理: 接触皮肤时立即用肥皂水冲洗, 吸入后转移至空气新鲜处。

本产品仅供科研用途, 不适用于临床或食品领域。