

4-溴-1H-吡咯并[3,2-c]吡啶

4-Bromo-1H-pyrrolo[3,2-c]pyridine



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-Bromo-1H-pyrrolo[3,2-c]pyridine
中文名称	4-溴-1H-吡咯并[3,2-c]吡啶
CAS 号	1000342-68-6
分子式	C ₇ H ₅ BrN ₂
分子量	197.032
纯度	>96%

产品说明

4-溴-1H-吡咯并[3,2-c]吡啶产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-溴-1H-吡咯并[3,2-c]吡啶 (CAS 号: 1000342-68-6) 是一种重要的含氮杂环化合物, 分子式为 $C_7H_5BrN_2$, 分子量 197.032。该化合物由吡咯环与吡啶环稠合而成, 4 号位的溴原子赋予其独特的反应活性。常温下为白色至类白色结晶粉末, 纯度 >96%, 易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、二氯甲烷等有机溶剂, 微溶于水。其结构中的溴原子可作为后续偶联反应的活性位点, 是构建复杂杂环体系的理想中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡咯并吡啶类衍生物的核心骨架, 该化合物在药物化学中具有显著价值。其分子结构可模拟生物体内嘌呤碱基的电子分布特征, 能与多种酶活性位点产生相互作用。研究表明, 该类结构单元对蛋白激酶、G 蛋白偶联受体等靶点具有调控潜力, 是开发抗肿瘤、抗炎及中枢神经系统药物的重要药效团。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本品主要用于: 1) 作为关键中间体合成蛋白激酶抑制剂; 2) 构建抗纤维化药物候选分子; 3) 开发 JAK/STAT 信号通路调节剂。在材料科学中, 可用于制备有机电致发光材料 (OLED) 的电子传输层组分。实验室常用作: 1) Suzuki-Miyaura 偶联反应的底物; 2) Buchwald-Hartwig 胺化反应的溴代前体; 3) 金属催化交叉偶联反应的模板分子。

4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体保护下密封储存, 长期保存温度应低于 $-20^{\circ}C$, 短期使用可存放于 $2-8^{\circ}C$ 干燥环境。开封后需充入氩气保护, 避免接触湿气和光照。使用时需在通风橱中操作, 推荐使用玻璃或聚四氟乙烯材质器具。溶解时建议先以少量 DMSO 预溶, 再稀释至目标浓度。工作浓度超过 10 mM 时需评估溶剂毒性对实验体系的影响。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行批次质量控制，确保杂质含量<4%。安全数据：

1) GHS 分类为急性毒性（口服）Category 4，皮肤刺激 Category 2；2) 操作时应佩戴护目镜、丁腈手套和防尘口罩；3) 意外接触眼睛需立即用大量清水冲洗 15 分钟；4) 废弃物应作为有害化学品处置。运输分类：UN2811，6.1 类危险品，包装等级 III。

（注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验体系进行优化验证。）