

5-溴-1-三异丙基硅烷-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶

5-Bromo-1-(triisopropylsilyl)-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-Bromo-1-(triisopropylsilyl)-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine
中文名称	5-溴-1-三异丙基硅烷-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶
CAS 号	858116-66-2
分子式	C ₁₆ H ₂₅ BrN ₂ Si
分子量	353.373
纯度	>96%

产品说明

5-溴-1-(三异丙基硅烷-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶)产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 5-Bromo-1-(triisopropylsilyl)-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine，是一种含溴及硅烷保护基的吡咯并吡啶衍生物。其 CAS 号为 858116-66-2，分子式为 C₁₆H₂₅BrN₂Si，分子量为 353.373，纯度经 HPLC 检测确认大于 96%。该化合物为白色至浅黄色结晶或粉末，具有明确的化学结构特征，三异丙基硅烷基团（TIPS）的引入显著增强了其空间位阻效应，适用于对官能团保护要求严格的合成反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡咯并吡啶类化合物的关键中间体，本产品 在杂环化学修饰中表现出高度反应活性。溴原子可作为偶联反应位点（如 Suzuki 偶联），而 TIPS 基团能选择性保护氮原子，避免副反应发生。其在构建药物分子骨架（如激酶抑制剂）和功能材料前体合成中具有不可替代的作用，尤其适用于需要精准控制反应位点的多步有机合成。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于以下领域：医药研发中作为 EGFR 抑制剂、CDK 抑制剂等靶向药物的合成砌块；材料科学中用于制备有机发光二极管（OLED）的功能性前体；农业化学中作为新型农药的中间体。实验室用途包括但不限于：过渡金属催化交叉偶联反应、氮杂环化合物的官能团化修饰、以及复杂分子骨架的模块化组装。

4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体（如氩气）保护下密封储存，温度控制在 -20° C 至 4° C 范围内，避免光照与湿气。开封后需在干燥箱中操作，并尽快恢复惰性气氛。使用前建议通过 TLC 或 NMR 验证纯度，溶解时优先选用无水 THF、二氯甲烷等脱水溶剂。反应体系中需严格除氧，以防硅烷基团水解。

5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱 (MS)、核磁共振 ($^1\text{H}/^{13}\text{C}$ NMR) 及元素分析 (EA) 三重验证, 符合 ACS 级标准。安全数据表明其具有刺激性, 操作时需佩戴护目镜、防化手套, 并在通风橱中进行。皮肤接触后应立即用大量清水冲洗, 吸入性暴露需转移至空气新鲜处。废弃物应作为有害化学废料处理, 遵守当地环保法规。

注: 具体实验方案建议参考文献 DOI: 10.1021/acs.joc.xxxxxxx (根据实际研究更新)。本说明仅涵盖基础信息, 特殊应用需进一步技术咨询。