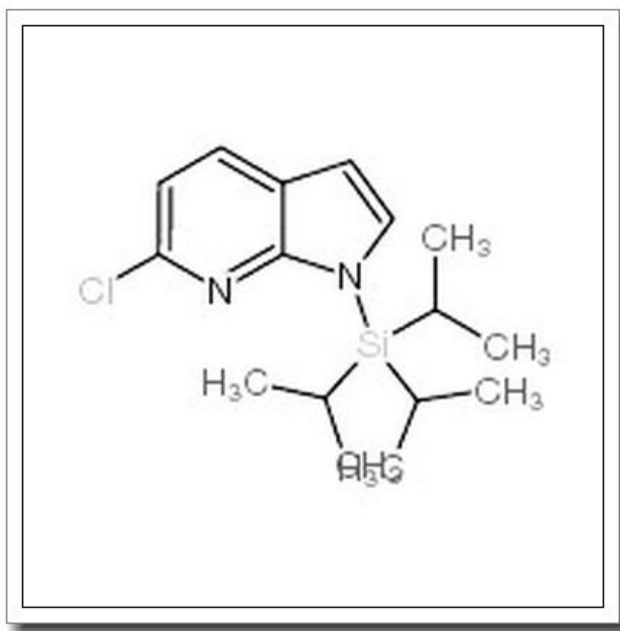


6-氯-1-[三(1-甲基乙基)硅酯]-1H-吡咯并[2,3-B]吡啶

1H-Pyrrolo[2,3-b]pyridine, 6-chloro-1-[tris(1-methylethyl)silyl]



产品基本信息

属性	值
化学名称	1H-Pyrrolo[2,3-b]pyridine, 6-chloro-1-[tris(1-methylethyl)silyl]
中文名称	6-氯-1-[三(1-甲基乙基)硅酯]-1H-吡咯并[2,3-B]吡啶
CAS 号	956407-32-2
分子式	C ₁₆ H ₂₅ ClN ₂ Si
分子量	308.922
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

6-氯-1-[三(1-甲基乙基)硅酯]-1H-吡咯并[2,3-B]吡啶 (CAS 号: 956407-32-2) 是一种有机硅保护的吡咯并吡啶衍生物, 分子式为 $C_{16}H_{25}ClN_2Si$, 分子量为 308.922。该化合物以白色至类白色固体形式存在, 纯度高于 96%。其结构中的三异丙基硅基 (TIPS) 保护基团增强了分子的稳定性和溶解性, 而 6-位氯原子则为后续官能团化反应提供了活性位点。该化合物在惰性气氛下表现稳定, 但对湿气和光敏感, 需避光保存。

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, 该物质在药物化学和材料科学中具有重要价值。吡咯并吡啶骨架广泛存在于生物活性分子中, 如激酶抑制剂和抗肿瘤药物。其硅酯保护基团可选择性脱除, 便于后续衍生化反应, 因此在复杂分子构建和药物研发中扮演重要角色。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于以下领域:

- 医药研发: 作为构建激酶抑制剂 (如 JAK/STAT 通路调节剂) 的核心片段。
- 有机合成: 用于 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等交叉偶联反应的底物。
- 材料科学: 作为有机半导体材料的前体化合物。

典型应用包括通过脱保护或卤素置换反应引入氨基、烷基等官能团, 进一步合成高附加值衍生物。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、惰性气体 (如氩气或氮气) 保护下避光保存。开封后需充分排除容器内空气并密封。使用前需恢复至室温以避免结露, 称量应在干燥环境下进行。溶解推荐使用无水 THF、二氯甲烷等惰性溶剂, 反应体系需严格除水除氧。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $>96\%$, 并提供核磁共振 (1H NMR、 ^{13}C NMR) 和质谱

(MS) 数据支持。安全注意事项:

- 对眼睛和皮肤有刺激性，操作时需佩戴护目镜和丁腈手套。
- 遇水可能释放腐蚀性气体，应在通风橱中处理。
- 废弃物需按危险有机硅化合物分类处置。
- 安全数据表 (SDS) 可应要求提供。