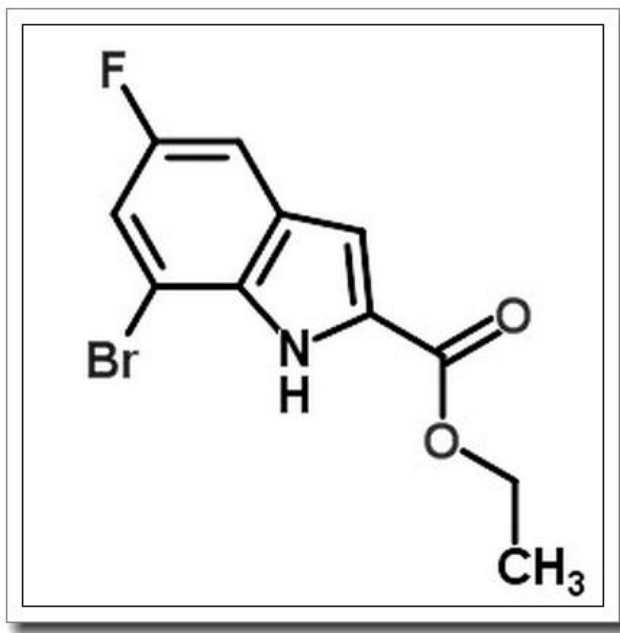


7-溴-5-氟-1H-吲哚-2-羧酸乙酯

Ethyl 7-bromo-5-fluoro-1H-indole-2-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 7-bromo-5-fluoro-1H-indole-2-carboxylate
中文名称	7-溴-5-氟-1H-吲哚-2-羧酸乙酯
CAS 号	396076-60-1
分子式	C ₁₁ H ₉ BrFN ₂ O ₂
分子量	286.097
纯度	>96%

产品说明

7-溴-5-氟-1H-吲哚-2-羧酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

7-溴-5-氟-1H-吲哚-2-羧酸乙酯 (Ethyl 7-bromo-5-fluoro-1H-indole-2-carboxylate) 是一种重要的卤代吲哚衍生物，化学式为 $C_{11}H_9BrFN_2$ ，分子量 286.097，CAS 号为 396076-60-1。该化合物为白色至类白色结晶性粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，具有典型的吲哚环结构和羧酸乙酯官能团，其溴和氟原子的引入显著增强了分子的反应活性与生物活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为吲哚类化合物的修饰衍生物，本产品在药物化学中具有关键作用。溴原子和氟原子的协同效应可提高分子与靶标蛋白的结合能力，同时增强代谢稳定性。其结构特征使其成为构建复杂生物活性分子（如激酶抑制剂或抗肿瘤药物）的核心中间体，尤其在开发基于吲哚骨架的候选药物中不可或缺。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于医药研发和有机合成领域。具体用途包括：作为关键中间体用于合成抗肿瘤、抗炎或抗病毒药物；在荧光探针开发中作为信号基团前体；在材料科学中用于构建功能性有机分子框架。其高反应性尤其适用于 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等过渡金属催化反应。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光保存，长期储存需充惰性气体保护。开封后应尽快使用，避免反复冻融。使用时需在干燥惰性气氛（如氮气或氩气）下操作，溶解推荐使用无水 DMF 或 THF 等极性非质子溶剂。实验人员应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，批次间质量稳定。安全数据表明，该化合物可能对眼睛、皮肤及呼吸系统造成刺激，操作应在通风橱中进行。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地化学品管理法规，禁止直接排入环境。

(注: 本说明基于现有研究数据, 实际应用前请查阅最新文献并开展小试实验验证。)