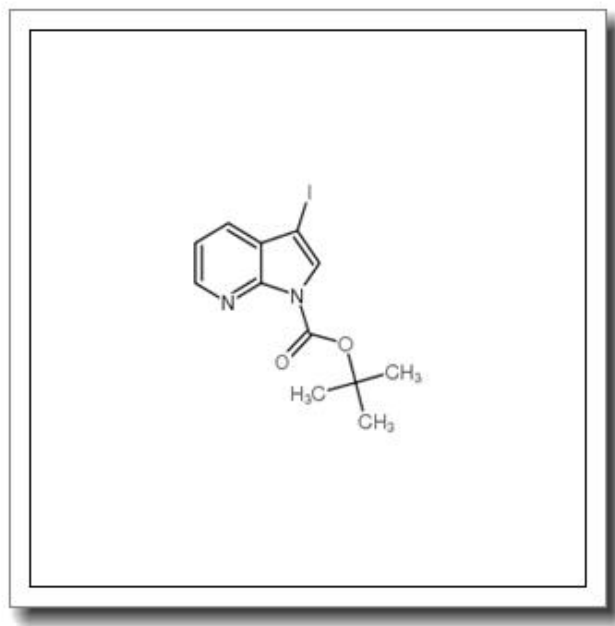


1-BOC-3-碘-7-氮杂吲哚

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



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl 3-iodopyrrolo[2, 3-b]pyridine-1-carboxylate</i>
中文名称	1-BOC-3-碘-7-氮杂吲哚
CAS 号	192189-18-7
分子式	C ₁₂ H ₁₃ IN ₂ O ₂
分子量	344.148
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-BOC-3-碘-7-氮杂吡啶 (tert-butyl 3-iodopyrrolo[2,3-b]pyridine-1-carboxylate) 是一种重要的杂环化合物, CAS 号为 192189-18-7, 分子式为 C₁₂H₁₃IN₂O₂, 分子量为 344.148。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在, 纯度通常不低于 96%。其结构中的 BOC (叔丁氧羰基) 保护基和碘原子使其成为有机合成中的关键中间体, 尤其在构建复杂杂环体系时表现出高反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在药物化学和生物化学领域具有显著价值。其核心结构 7-氮杂吡啶是多种生物活性分子的骨架, 常见于激酶抑制剂和抗肿瘤药物的设计中。碘原子的引入进一步增强了其偶联反应 (如 Suzuki 偶联) 的适用性, 为靶向分子的结构修饰提供了灵活位点。

3. 主要应用领域与具体用途

1-BOC-3-碘-7-氮杂吡啶广泛应用于医药研发和材料科学领域。在药物合成中, 它常用于构建抗癌、抗病毒及中枢神经系统药物的中间体。此外, 其作为有机发光材料的前体, 在光电材料领域也有潜在应用。具体用途包括但不限于:

- 作为 Suzuki、Buchwald-Hartwig 等偶联反应的底物
- 用于合成蛋白激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂
- 功能化材料的分子构建模块

4. 储存条件与使用建议

该化合物需避光、密封保存于 -20° C 至 4° C 的干燥环境中, 长期储存建议充入惰性气体 (如氮气)。使用时需在惰性气氛 (如氩气) 下操作, 避免接触强氧化剂或潮湿环境。溶解推荐使用无水 DMF 或 THF 等极性非质子溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测, 确保纯度 ≥96%。安全信息方面, 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激, 操作时应穿戴防护手套、护目镜及防尘口罩。

若不慎接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地环保法规，建议通过专业化学品回收机构处置。