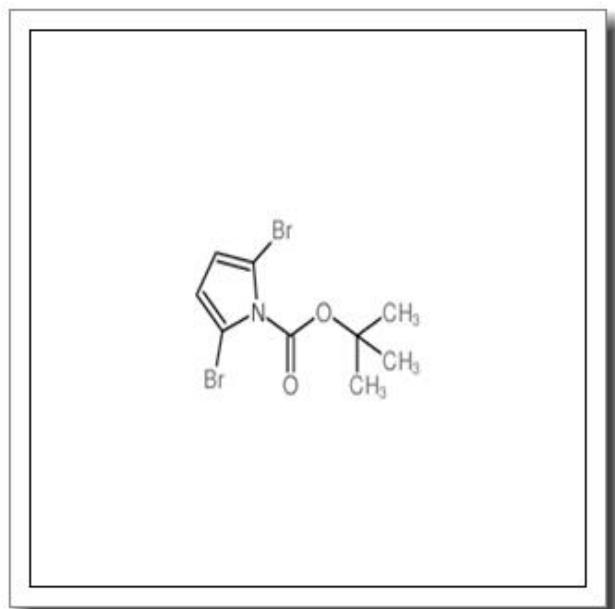


# 2,5-二溴-1H-吡咯-1-羧酸-1,1-二甲基乙酯

*tert-butyl 2,5-dibromopyrrole-1-carboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 2,5-dibromopyrrole-1-carboxylate
中文名称	2,5-二溴-1H-吡咯-1-羧酸-1,1-二甲基乙酯
CAS 号	117657-38-2
分子式	C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> Br <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	324.997
纯度	≥96%

## 产品说明

### 2,5-二溴-1H-吡咯-1-羧酸-1,1-二甲基乙酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 tert-butyl 2,5-dibromopyrrole-1-carboxylate, CAS 号 117657-38-2, 分子式 C<sub>9</sub>H<sub>11</sub>Br<sub>2</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, 分子量 324.997, 是一种高纯度 (≥96%) 的溴代吡咯衍生物。其结构中的叔丁氧羰基 (Boc) 保护基与二溴取代吡咯环赋予其独特的化学稳定性, 常温下为白色至类白色结晶粉末, 易溶于有机溶剂如二氯甲烷、THF 和乙醚, 但在水中溶解度较低。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为吡咯类化合物的关键中间体, 其溴原子活性位点可通过交叉偶联反应 (如 Suzuki 或 Sonogashira 反应) 进一步功能化, 广泛应用于杂环化合物的合成。Boc 保护基的存在使其在酸性条件下易于脱保护, 为药物分子中吡咯骨架的定向修饰提供重要合成路径。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药研发和有机合成领域:

- 3.1 药物化学: 作为抗菌、抗肿瘤活性分子的核心砌块, 用于构建含吡咯环的候选药物。
- 3.2 材料科学: 参与合成光电功能材料或配体设计, 如金属有机框架 (MOFs) 的前体。
- 3.3 学术研究: 作为标准品用于吡咯衍生物反应机理研究或教学实验。

#### 4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存: 需密封保存于干燥、避光的惰性气体 (如氩气) 环境中, 推荐温度 -20° C, 避免与氧化剂或强酸接触。
- 4.2 使用: 建议在通风橱中操作, 溶解时优先选用无水级溶剂以降低水解风险。开封后需尽快使用, 剩余产品应重新充氮密封。

## 5. 质量控制与安全信息

5.1 质量控制：通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，核磁共振（ $^1\text{H}/^{13}\text{C}$  NMR）和质谱（MS）验证结构。

5.2 安全提示：本品对眼睛和皮肤有刺激性，操作时需佩戴防护手套及护目镜。若接触皮肤，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应作为有害化学废物处理，遵守当地环保法规。

（注：本说明基于现有实验数据，具体应用需结合用户工艺验证。产品规格可能因批次调整，请以随货质检报告为准。）