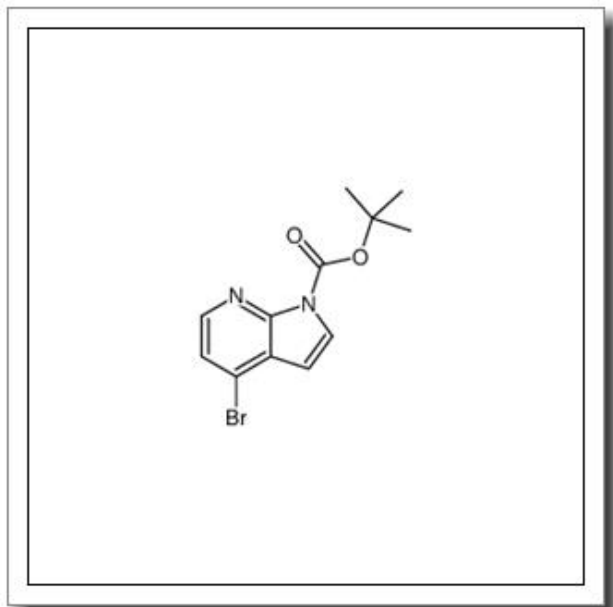


4-溴-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶-1-羧酸叔丁酯

tert-Butyl 4-bromo-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-Butyl 4-bromo-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine-1-carboxylate
中文名称	4-溴-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	1228014-35-4
分子式	C ₁₂ H ₁₃ BrN ₂ O ₂
分子量	297.148
纯度	≥96%

产品说明

4-溴-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶-1-羧酸叔丁酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 tert-Butyl 4-bromo-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine-1-carboxylate, CAS 号为 1228014-35-4, 是一种重要的吡咯并吡啶类衍生物。其分子式为 C₁₂H₁₃BrN₂O₂, 分子量为 297.148, 纯度 ≥ 96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 具有典型的芳香杂环结构, 叔丁氧羰基 (Boc) 保护基赋予其良好的稳定性, 溴原子则为后续官能团化提供了活性位点。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡咯并吡啶骨架的溴代衍生物, 该化合物是构建复杂生物活性分子的关键中间体。其结构中的溴原子可通过偶联反应 (如 Suzuki、Buchwald-Hartwig) 引入芳基或杂环基团, 而 Boc 保护基可在酸性条件下选择性脱除, 便于后续修饰。这类结构广泛存在于激酶抑制剂、抗肿瘤和抗病毒药物中, 具有显著的药物化学价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发和有机合成领域。在药物化学中, 它是合成靶向抗癌化合物 (如 ALK 抑制剂) 的重要砌块; 在材料科学中, 可用于制备光电功能材料。典型应用包括: 作为中间体用于构建激酶抑制剂库, 通过交叉偶联反应制备 C-4 位衍生化产物, 或经脱保护后进一步修饰吡咯氮原子。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° 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 (如氮气手套箱) 中操作, 溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 微溶于醇类。建议反应前通过 TLC 或 HPLC 监测纯度, 必要时进行重结晶纯化。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 和 NMR 严格质检, 确保批次一致性。安全数据表明, 该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时应佩戴防护手套、护目镜, 并在通风橱中进行。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危险化学品管理规定，避免与强氧化剂混放。

（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。）