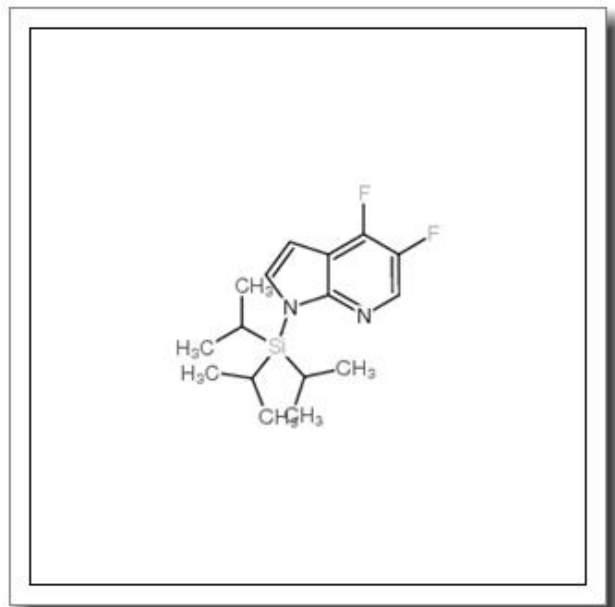


# 4,5-二氟-1-[三(1-甲基乙基)硅酯]-1H-吡咯并[2,3-B]吡啶

*1H-Pyrrolo[2,3-b]pyridine, 4,5-difluoro-1-[tris(1-methylethyl)silyl]*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	1H-Pyrrolo[2,3-b]pyridine, 4,5-difluoro-1-[tris(1-methylethyl)silyl]
中文名称	4,5-二氟-1-[三(1-甲基乙基)硅酯]-1H-吡咯并[2,3-B]吡啶
CAS 号	685513-89-7
分子式	C <sub>16</sub> H <sub>24</sub> F <sub>2</sub> N <sub>2</sub> Si
分子量	310.457
纯度	≥96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

本品为 4,5-二氟-1-[三(1-甲基乙基)硅酯]-1H-吡咯并[2,3-B]吡啶 (CAS 号: 685513-89-7), 化学式为 C<sub>16</sub>H<sub>24</sub>F<sub>2</sub>N<sub>2</sub>Si, 分子量 310.457, 纯度 ≥96%。该化合物属于吡咯并吡啶衍生物, 结构中含有二氟取代基及三异丙基硅酯保护基团, 具有显著的疏水性和空间位阻效应。其固态呈白色至类白色结晶粉末, 需避光保存, 易溶于有机溶剂如二氯甲烷、THF, 微溶于水。

### 2. 生物化学功能与重要性

该分子作为有机硅修饰的杂环化合物, 其吡咯并吡啶骨架是构建生物活性分子的重要药效团, 广泛应用于药物化学领域。二氟取代可增强代谢稳定性, 而硅酯基团可作为临时保护基或前药设计的关键位点。其在激酶抑制剂、抗肿瘤及抗病毒药物研发中具有潜在价值, 尤其适用于靶向蛋白-蛋白相互作用的高选择性分子开发。

### 3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药中间体合成, 特别是用于构建含氟杂环类候选药物分子。具体用途包括: 1) 作为核苷类似物修饰的前体; 2) 用于 PD-1/PD-L1 信号通路抑制剂的结构优化; 3) 在荧光标记探针中作为疏水模块。实验室级产品适用于小规模有机合成及机理研究, 工业级可用于公斤级放大生产。

### 4. 储存条件与使用建议

建议储存于-20℃惰性气体(如氩气)保护的密闭容器中, 避免湿气和光照。开封后需在干燥箱中操作, 剩余物料应立即充氮密封。使用时应佩戴防护手套、护目镜及防毒面具, 在通风橱中溶解或反应。建议以无水 DMF 或乙醚为溶剂, 避免强酸/强碱条件导致硅酯水解。

### 5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, 重金属含量 <10ppm, 符合医药研发标准。安全数据表明其具有刺激性, 可能引起皮肤/眼睛灼伤, 操作后需彻底冲洗接触部位。废弃物

应作为有害化学品处理，不可直接排放。运输分类为 UN2811（6.1 类），需提供 MSDS 及危险品申报文件。