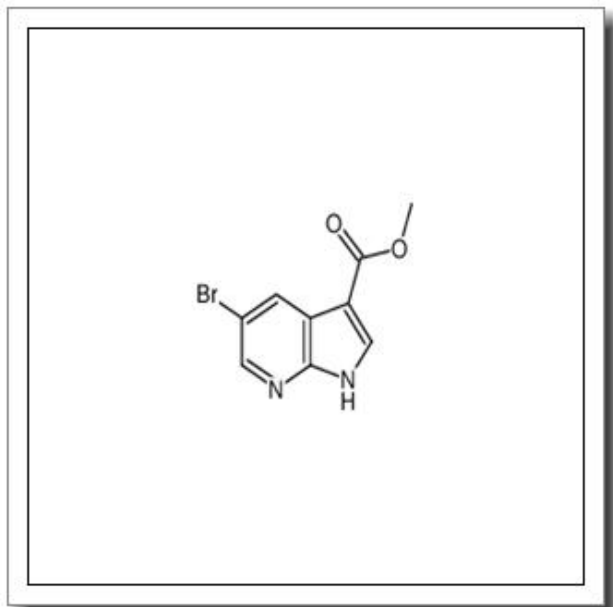


5-溴-1H-吡咯并[2,3-B]吡啶-3-羧酸甲酯

Methyl 5-bromo-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine-3-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 5-bromo-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine-3-carboxylate
中文名称	5-溴-1H-吡咯并[2,3-B]吡啶-3-羧酸甲酯
CAS 号	872619-43-7
分子式	C ₉ H ₇ BrN ₂ O ₂
分子量	255.068
纯度	≥ 96%

产品说明

5-溴-1H-吡咯并[2,3-B]吡啶-3-羧酸甲酯 (Methyl 5-bromo-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine-3-carboxylate) 是一种重要的杂环化合物, CAS 号为 872619-43-7, 分子式为 C₉H₇BrN₂O₂, 分子量为 255.068。该化合物为白色至浅黄色结晶粉末, 纯度 ≥96%, 具有吡咯并吡啶骨架结构, 其溴取代基和酯基赋予其独特的反应活性, 适合作为有机合成中间体或药物研发的关键砌块。

在生物化学功能方面, 该化合物因其杂环结构的电子特性和空间位阻, 常被用于构建更复杂的生物活性分子。吡咯并吡啶类化合物在药物化学中具有广泛的应用潜力, 例如作为激酶抑制剂、抗肿瘤或抗病毒药物的前体。其溴原子可进一步通过偶联反应引入其他功能基团, 而甲酯基团则可通过水解或氨解转化为羧酸或酰胺衍生物。

该产品的主要应用领域包括医药研发和有机合成。在医药领域, 它可作为先导化合物用于设计新型激酶抑制剂或抗增殖剂。在材料科学中, 其刚性杂环结构可能用于开发功能性材料。实验室中常利用其作为模板分子, 通过 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等反应构建多样性化合物库。

储存条件建议为避光、密封, 置于 2-8°C 干燥环境中, 长期保存需充惰性气体保护。使用前需恢复至室温以避免结露。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、二氯甲烷等有机溶剂, 水溶性较差, 实际操作中需根据反应体系选择合适的溶剂。

质量控制通过 HPLC、NMR 和质谱确保纯度和结构准确性。安全信息显示该化合物对眼睛、皮肤及呼吸系统有刺激性, 操作时需佩戴防护手套、护目镜并在通风橱中进行。若不慎接触, 应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地法规, 避免直接排放至环境中。

本产品仅限科研用途, 不适用于临床或食品领域。建议使用者查阅最新版材料安全数据表 (MSDS) 以获取详细毒理学数据及应急处理方案。