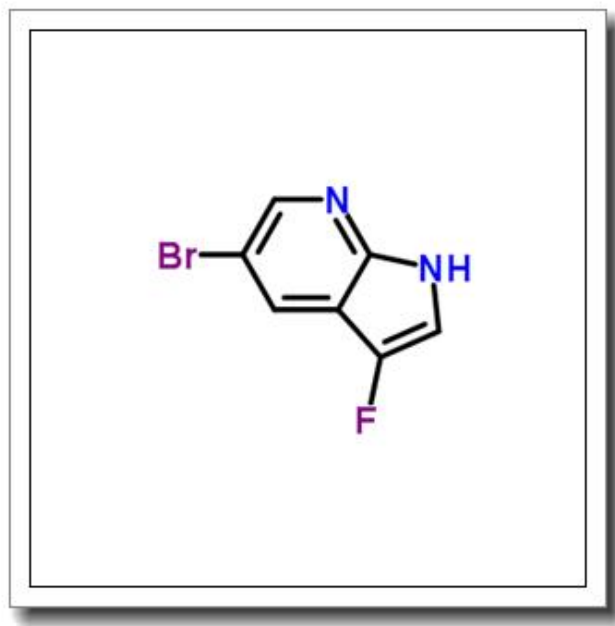


# 5-溴-3-氟-1H-吡咯并[2,3-B]吡啶

*5-Bromo-3-fluoro-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	5-Bromo-3-fluoro-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine
中文名称	5-溴-3-氟-1H-吡咯并[2,3-B]吡啶
CAS 号	1111637-68-3
分子式	C <sub>7</sub> H <sub>4</sub> BrFN <sub>2</sub>
分子量	215.023
纯度	≥96%

## 产品说明

### 5-溴-3-氟-1H-吡咯并[2,3-B]吡啶产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

5-溴-3-氟-1H-吡咯并[2,3-B]吡啶 (CAS 号: 1111637-68-3) 是一种含卤素杂环化合物, 分子式为  $C_7H_4BrFN_2$ , 分子量为 215.023。该化合物由吡咯并吡啶骨架构成, 在 5 位和 3 位分别引入溴和氟取代基, 赋予其独特的电子效应和空间位阻特性。常温下为白色至类白色结晶粉末, 纯度  $\geq 96\%$ , 可溶于常见有机溶剂如 DMSO、甲醇和乙腈, 微溶于水。其结构中的溴原子和氟原子使其成为重要的合成中间体, 尤其在药物化学和材料科学领域具有广泛应用。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为杂环化合物的衍生物, 5-溴-3-氟-1H-吡咯并[2,3-B]吡啶在生物活性分子设计中表现出显著优势。氟原子的引入可增强化合物的脂溶性和代谢稳定性, 而溴原子则为后续偶联反应 (如 Suzuki 偶联) 提供活性位点。该分子骨架常见于激酶抑制剂和 G 蛋白偶联受体调节剂的开发中, 能够通过靶向蛋白质结合域调节信号通路, 在抗肿瘤和抗炎药物研发中具有潜在价值。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药和有机合成领域。在药物研发中, 它可作为关键中间体用于构建含吡咯并吡啶结构的候选药物, 例如用于治疗非小细胞肺癌的 EGFR 抑制剂。在材料科学中, 其刚性杂环结构可用于设计荧光探针或有机半导体材料。此外, 在学术研究中, 它常被用于探索卤素键相互作用和分子识别机制。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在  $-20^{\circ}C$  下避光保存, 长期储存需置于惰性气体 (如氩气) 保护环境。开封后应避免反复冻融, 以防止吸湿或降解。使用时需在干燥环境下操作, 建议佩戴防护手套和护目镜。溶解时可优先选择 DMSO 配制母液, 再稀释至工作浓度。实验废料应按照有害化学品规范处置。

## 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 $\geq 96\%$ 。MSDS 数据显示其具有刺激性，可能引起皮肤和眼睛不适，操作时应在通风橱中进行。避免吸入粉尘或接触黏膜，如意外接触需立即用大量清水冲洗并就医。运输分类为非危险品，但需符合一般化学品运输规范。

注：以上信息基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件进一步优化。