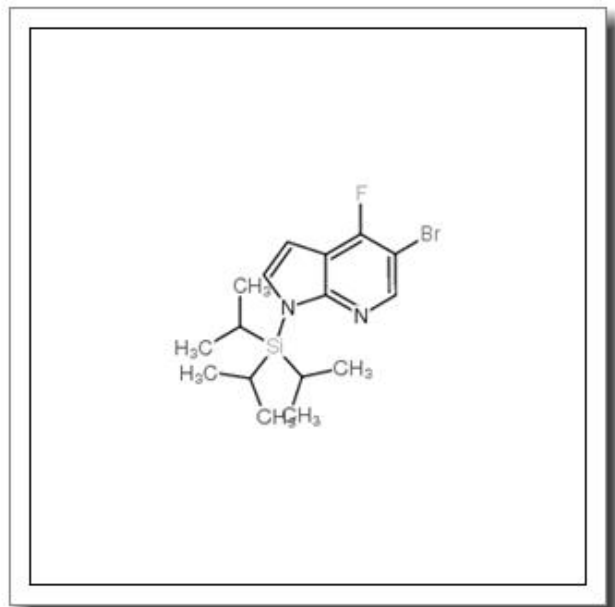


5-溴-4-氟-1-[三(1-甲基乙基)甲硅烷基]-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶

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



产品基本信息

属性	值
化学名称	1H-Pyrrolo[2,3-b]pyridine, 5-bromo-4-fluoro-1-[tris(1-methylethyl)silyl]
中文名称	5-溴-4-氟-1-[三(1-甲基乙基)甲硅烷基]-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶
CAS 号	685513-91-1
分子式	C ₁₆ H ₂₄ BrFN ₂ Si
分子量	371.363
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品为 5-溴-4-氟-1-[三(1-甲基乙基)甲硅烷基]-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶, 化学名称 1H-Pyrrolo[2,3-b]pyridine, 5-bromo-4-fluoro-1-[tris(1-methylethyl)silyl], CAS 号 685513-91-1。其分子式为 C₁₆H₂₄BrFN₂Si, 分子量 371.363, 纯度 ≥96%。该化合物是一种含溴、氟及硅烷基的吡咯并吡啶衍生物, 具有独特的电子结构和空间位阻效应, 适用于有机合成及药物化学研究。

2. 生物化学功能与重要性

该分子中的溴和氟原子赋予其高反应活性, 可作为关键中间体用于构建复杂杂环体系。硅烷基团的引入增强了化合物的稳定性, 同时便于后续官能团转化。其在核苷类似物、激酶抑制剂及荧光探针的开发中具有潜在价值, 尤其适用于靶向药物设计中的结构修饰。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发和材料科学领域。在药物化学中, 可作为构建抗肿瘤或抗病毒药物的核心骨架; 在材料领域, 可用于合成有机光电功能分子。具体用途包括:

1. 作为 Suzuki 或 Buchwald-Hartwig 偶联反应的底物
2. 用于氟代杂环化合物的库构建
3. 在 PROTAC 技术中作为连接子修饰单元

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C、惰性气体 (如氩气) 保护下避光保存, 长期储存需置于干燥器中。开封后需尽快使用, 避免反复冻融。使用时应在通风橱中操作, 佩戴防护手套及护目镜。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 推荐使用前通过氮气鼓泡除氧。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, 核磁共振 (1H NMR、13C NMR) 及质谱 (MS) 验证

结构。安全信息显示，该化合物对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应避免直接接触。如发生泄漏，需用惰性吸附材料处理并按规定废弃。废弃物需作为有害化学品处置，遵守当地环保法规。急救措施包括：眼部接触时用大量清水冲洗 15 分钟，皮肤接触后立即脱去污染衣物并用肥皂水清洗。