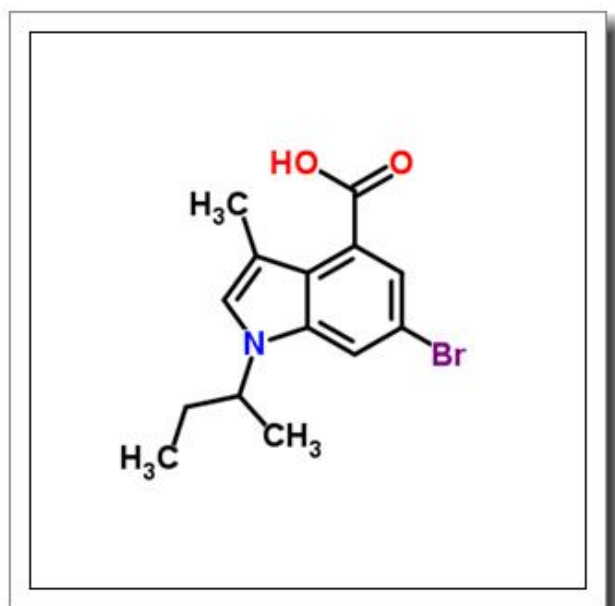


6-bromo-1-(sec-butyl)-3-methyl-1H-indole-4-carboxylic acid

6-bromo-1-(sec-butyl)-3-methyl-1H-indole-4-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	6-bromo-1-(sec-butyl)-3-methyl-1H-indole-4-carboxylic acid
中文名称	6-bromo-1-(sec-butyl)-3-methyl-1H-indole-4-carboxylic acid
CAS 号	1346575-54-9
分子式	C ₁₄ H ₁₆ BrN ₂ O ₂
分子量	310.186
纯度	≥ 96%

产品说明

6-溴-1-(仲丁基)-3-甲基-1H-吡啶-4-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

6-溴-1-(仲丁基)-3-甲基-1H-吡啶-4-羧酸 (CAS 号: 1346575-54-9) 是一种结构独特的溴代吡啶衍生物, 分子式为 $C_{14}H_{16}BrNO_2$, 分子量 310.186。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在, 纯度 $\geq 96\%$, 具有显著的疏水性和芳香性特征。其结构中的羧酸基团和溴原子为后续衍生化反应提供了关键活性位点, 仲丁基侧链则赋予分子特定的空间位阻效应。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡啶类化合物的修饰衍生物, 该分子在药物化学中具有重要价值。其核心结构可模拟天然色氨酸代谢产物, 通过调控酶活性或受体结合参与信号转导。溴原子的引入增强了分子的电负性, 使其成为过渡金属催化反应 (如 Suzuki 偶联) 的理想底物, 而羧酸基团则为肽键偶联或酯化反应提供了修饰平台。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域:

- 3.1 药物研发: 作为激酶抑制剂或 GPCR 配体的关键中间体, 用于抗肿瘤、抗炎药物的结构优化。
- 3.2 材料科学: 用于合成有机电致发光材料 (OLED) 的功能性前体。
- 3.3 化学生物学: 作为荧光探针或光交联剂的构建模块, 用于蛋白质标记研究。

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存条件: 需避光密封保存于 $-20^{\circ}C$ 干燥环境中, 惰性气体保护可延长稳定性。
- 4.2 复溶建议: 使用前需恢复至室温, 推荐以 DMF 或 DMSO 为溶剂配制母液 (浓度 ≤ 10 mM)。
- 4.3 操作防护: 应在通风橱中操作, 佩戴防化手套及护目镜, 避免吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

5.1 质量控制：通过 HPLC (C18 柱, 甲醇/水梯度洗脱) 确保纯度, 质谱 (ESI-MS) 验证分子量。

5.2 安全数据：属于刺激性化学品 (GHS 分类: Skin Irrit. 2, Eye Irrit. 2), 不慎接触时需立即用大量清水冲洗。

5.3 废弃物处理：需按危险有机废液处理, 不可直接排入下水道。

本产品仅限科研用途, 不适用于临床或食品领域。具体应用前请查阅最新文献并开展预实验验证。