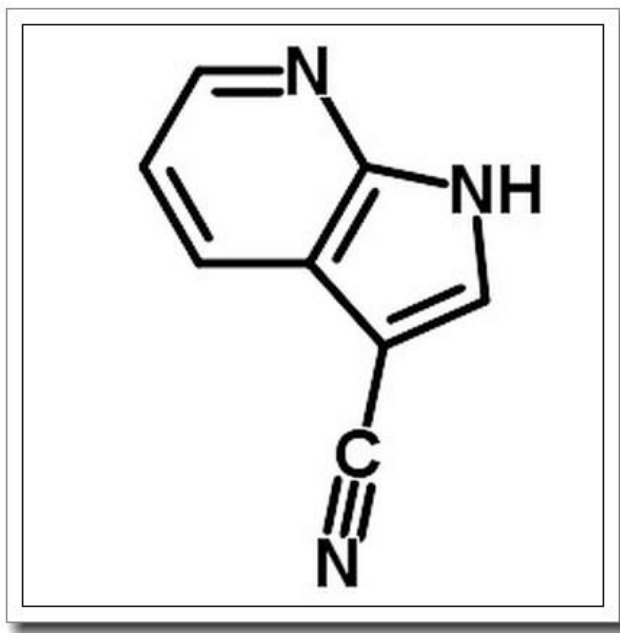


3-氰基-7-氮杂吲哚

1H-Pyrrolo[2, 3-b]pyridine-3-carbonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	1H-Pyrrolo[2, 3-b]pyridine-3-carbonitrile
中文名称	3-氰基-7-氮杂吲哚
CAS 号	4414-89-5
分子式	C ₈ H ₅ N ₃
分子量	143.145
纯度	>96%

产品说明

1H-吡咯并[2,3-b]吡啶-3-甲腈 (3-氰基-7-氮杂吡啶) 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 1H-Pyrrolo[2,3-b]pyridine-3-carbonitrile，中文别名 3-氰基-7-氮杂吡啶，CAS 号 4414-89-5。分子式 C₈H₅N₃，分子量 143.145，纯度 ≥96%。该化合物属于氮杂吡啶衍生物，具有吡咯并吡啶骨架和氰基官能团，极性适中，可溶于二甲基亚砜 (DMSO)、甲醇等有机溶剂，微溶于水。其结构特征使其成为重要的医药中间体和生物活性分子构建模块。

2. 生物化学功能与重要性

3-氰基-7-氮杂吡啶是杂环化合物中的关键药效团，其结构广泛存在于激酶抑制剂和抗肿瘤药物中。氰基的强电子 withdrawing 特性可增强分子与靶蛋白的氢键相互作用，而氮杂吡啶骨架则能模拟嘌呤结构，干扰 ATP 结合位点。该分子在调节细胞信号通路 (如 JAK/STAT、VEGFR 等) 中表现出显著潜力，是开发抗炎、抗纤维化和抗增殖药物的优选骨架。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于以下领域：

1. 医药研发：作为激酶抑制剂 (如 EGFR、CDK4/6 抑制剂) 的核心片段，用于非小细胞肺癌、乳腺癌等靶向药物开发；
2. 有机合成：通过 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等反应构建复杂杂环体系；
3. 材料科学：作为光电材料前体，用于制备有机发光二极管 (OLED) 中的电子传输层材料。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，避光、防潮，建议温度 -20° C 至 4° C 长期保存，室温短期使用需充氮保护。使用时需在干燥惰性气体环境下操作 (如氩气手套箱)，避免与强

氧化剂接触。溶解推荐使用无水 DMSO（浓度 ≤ 10 mM），溶液现配现用，避免反复冻融。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC（紫外检测器 254 nm）控制纯度，批次间偏差 $< 2\%$ 。该产品对眼睛和呼吸道有刺激性，操作时需佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套。若不慎接触皮肤，立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物应作为有害化学品处理，遵守当地法规。

（注：本说明基于现有研究数据，实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。）