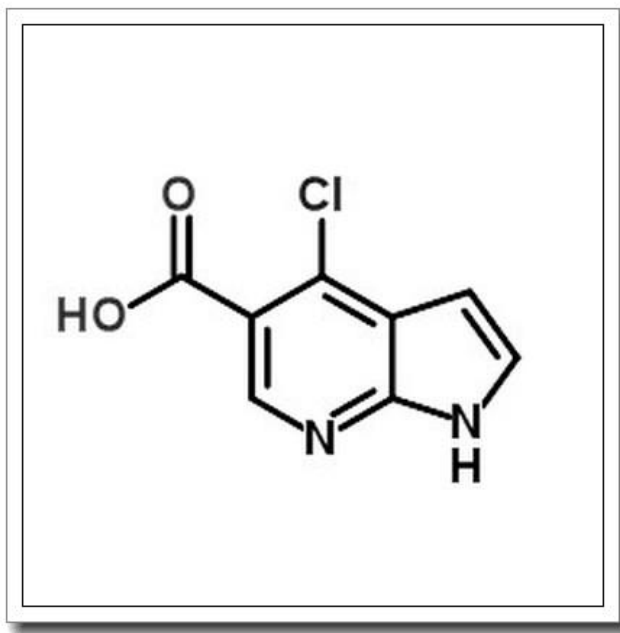


4-氯-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶-5-羧酸

4-chloro-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine-5-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-chloro-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine-5-carboxylic acid
中文名称	4-氯-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶-5-羧酸
CAS 号	920966-03-6
分子式	C ₈ H ₅ ClN ₂ O ₂
分子量	196.59
纯度	>96%

产品说明

4-氯-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶-5-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-氯-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶-5-羧酸 (CAS 号: 920966-03-6) 是一种杂环羧酸衍生物, 分子式为 $C_8H_5ClN_2O_2$, 分子量 196.59。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在, 纯度高于 96%, 具有吡咯并吡啶骨架结构, 其 5 位羧基和 4 位氯原子赋予其独特的化学反应性。该物质易溶于极性有机溶剂 (如 DMSO、甲醇), 微溶于水, 需在酸性或碱性条件下调节溶解度。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡咯并吡啶类化合物的关键中间体, 该分子在药物化学中具有重要价值。其结构中的氯原子可作为亲电反应位点参与偶联反应, 而羧基则便于进一步衍生化为酯、酰胺或酰氯。这类结构常见于激酶抑制剂和抗肿瘤药物的研发中, 尤其在靶向性小分子药物的设计中作为核心药效团或连接模块。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于医药研发领域, 具体包括:

- 作为合成抗肿瘤药物 (如 ALK 或 JAK 抑制剂) 的关键中间体
- 用于构建荧光探针或生物标记物的杂环骨架
- 在有机催化反应中作为配体或底物参与 C-C 键偶联反应
- 学术研究中用于探索杂环化合物的构效关系

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、避光、干燥条件下长期储存, 短期使用可存放于 $2-8^{\circ}C$ 环境。开封后需充入惰性气体 (如氮气) 保护, 避免吸湿降解。使用时需在通风橱中操作, 建议以 DMSO 配制母液 (浓度 $\leq 10mM$), 避免反复冻融。水溶液需现配现用, pH 值应调节至 6-8 以维持稳定性。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 重金属含量 $< 10ppm$, 符合药物研发标准。安全数据

表明其具有刺激性，操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。若不慎接触皮肤，应立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物应作为有害化学品处置，避免直接排放。详细毒理学数据可参考 MSDS 第 11 节（急性毒性：LD50 大鼠口服>500mg/kg）。

注：本说明基于现有研究数据编制，实际应用前请进行小规模试验验证。