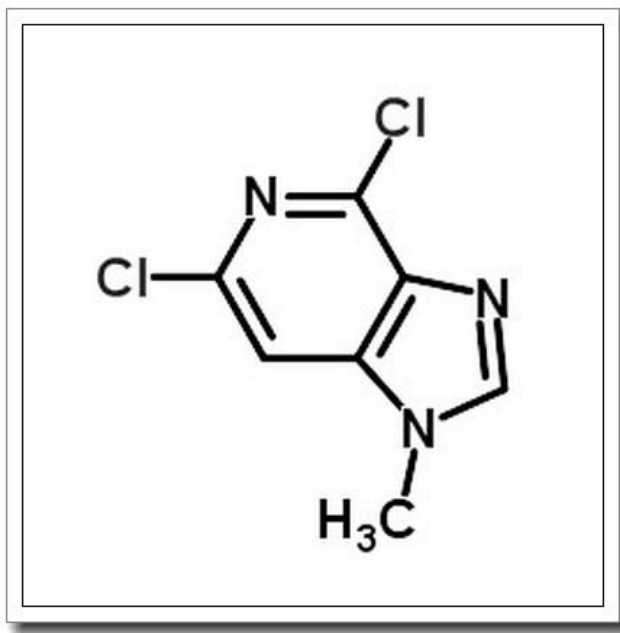


# 4,6-二氯-1-甲基-1H-咪唑并[4,5-c]吡啶

*4,6-Dichloro-1-methyl-1H-imidazo[4,5-c]pyridine*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	4,6-Dichloro-1-methyl-1H-imidazo[4,5-c]pyridine
中文名称	4,6-二氯-1-甲基-1H-咪唑并[4,5-c]吡啶
CAS 号	887147-19-5
分子式	C7H5Cl2N3
分子量	202.041
纯度	>96%

## 产品说明

### 4,6-二氯-1-甲基-1H-咪唑并[4,5-c]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 4,6-二氯-1-甲基-1H-咪唑并[4,5-c]吡啶，CAS 号为 887147-19-5，分子式 C<sub>7</sub>H<sub>5</sub>Cl<sub>2</sub>N<sub>3</sub>，分子量 202.041。其结构中含咪唑并吡啶骨架和两个氯取代基，赋予其独特的电子效应和空间位阻特性。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，熔点为 215-218°C（分解），易溶于二甲基亚砜（DMSO）和甲醇，微溶于水（25°C 时溶解度 < 0.1 mg/mL）。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为杂环芳烃衍生物，具有显著的生物活性。其咪唑环氮原子可参与配位作用，而氯原子提供了亲电反应位点，使其成为构建激酶抑制剂或抗肿瘤药物的关键中间体。在药物化学中，此类结构常作为 ATP 竞争性抑制剂的药效团，干扰异常信号通路。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

3.1 医药研发：用于合成靶向 PI3K/mTOR 通路的小分子抑制剂，在癌症治疗研究中具有潜在价值。

3.2 材料科学：作为有机发光二极管（OLED）的前驱体，参与构建电子传输层材料。

3.3 农药化学：可衍生化为新型杀虫剂的活性成分，作用于昆虫神经系统。

#### 4. 储存条件与使用建议

4.1 储存：密封保存于 -20°C 干燥环境中，避免光照和湿度（建议湿度 ≤ 30%）。

4.2 稳定性：在惰性气体（如氩气）保护下可稳定保存 24 个月，溶液状态需现配现用。

4.3 操作建议：使用时应佩戴 N95 口罩、丁腈手套及护目镜，通风橱内操作。

#### 5. 质量控制与安全信息

5.1 质检标准：通过 <sup>1</sup>H NMR、<sup>13</sup>C NMR 和质谱进行结构确证，残留溶剂符合 ICH

Q3C 标准。

5.2 安全数据：急性毒性（LD50 大鼠口服）为 320 mg/kg，属于有害物质（GHS 分类：H302）。

5.3 应急处理：皮肤接触时立即用大量清水冲洗 15 分钟，吸入暴露需转移至空气新鲜处。

本产品仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。建议使用者查阅最新版 Material Safety Data Sheet（MSDS）获取详细安全指引。