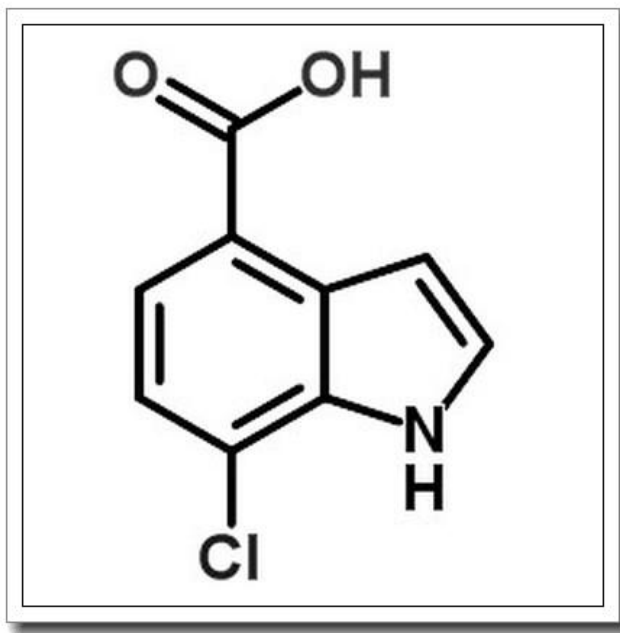


7-氯-4-吲哚羧酸

7-Chloro-1H-indole-4-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	7-Chloro-1H-indole-4-carboxylic acid
中文名称	7-氯-4-吲哚羧酸
CAS 号	588688-45-3
分子式	C ₉ H ₆ ClN ₂ O ₂
分子量	195.602
纯度	>96%

产品说明

7-氯-4-吲哚羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

7-氯-4-吲哚羧酸 (7-Chloro-1H-indole-4-carboxylic acid) 是一种含氯取代基的吲哚羧酸衍生物, 化学式为 $C_9H_6ClN_2O_2$, 分子量 195.602, CAS 号为 588688-45-3。本品为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 >96%, 具有吲哚环的典型芳香性和羧酸基团的反应活性。其结构中 7 位氯原子的引入增强了分子的电子效应, 使其在有机合成中表现出独特的反应选择性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是吲哚类生物碱的重要中间体, 其羧酸基团可通过酯化、酰胺化等反应进一步修饰, 广泛应用于药物化学和生物活性分子设计。氯原子的存在提高了分子的脂溶性和代谢稳定性, 使其在抗肿瘤、抗炎及抗菌药物研发中具有潜在价值。此外, 其结构特征可作为荧光探针或酶抑制剂的构建模块。

3. 主要应用领域与具体用途

7-氯-4-吲哚羧酸主要用于医药和农药领域的研究与开发。在药物合成中, 它是构建 EGFR 抑制剂、5-HT 受体调节剂等小分子药物的关键片段。在农业化学领域, 可作为杀菌剂或植物生长调节剂的前体。实验室中常用于杂环化合物库的构建及结构-活性关系 (SAR) 研究。

4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于干燥、避光环境中, 推荐储存温度为 2-8°C。长期存放建议充入惰性气体 (如氮气) 保护。使用时应穿戴防护手套和护目镜, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明, 其易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇, 微溶于水, 需根据实验需求选择合适的溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 >96%, 批次间质量稳定。安全数据表明, 其急性毒性 (LD50) 属中等危害类别, 操作时需在通风橱中进行。如不慎接触, 立即用大量清

水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地法规，建议通过专业化学废料回收渠道处置。

注：以上信息基于现有实验数据，实际应用前请查阅最新文献并开展小规模预实验验证。