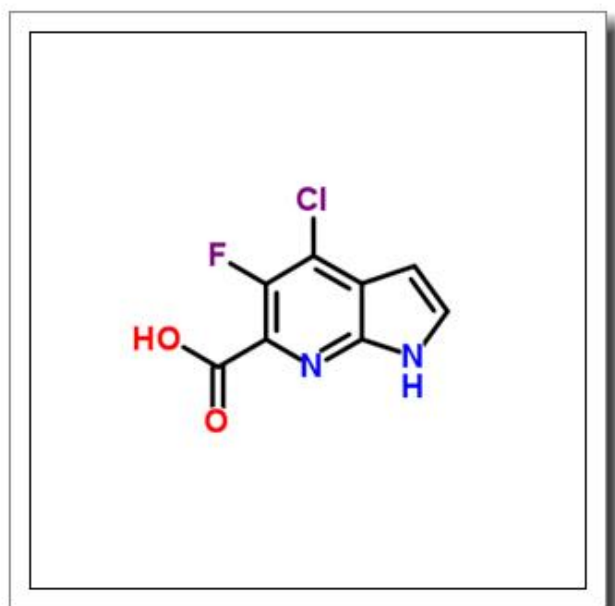


# 4-Chloro-5-fluoro-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine-6-carboxylic acid

*4-Chloro-5-fluoro-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine-6-carboxylic acid*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	4-Chloro-5-fluoro-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine-6-carboxylic acid
中文名称	4-Chloro-5-fluoro-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine-6-carboxylic acid
CAS 号	1246088-38-9
分子式	C <sub>8</sub> H <sub>4</sub> ClFN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	214.581
纯度	≥96%

## 产品说明

### 4-氯-5-氟-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶-6-羧酸产品说明

#### 1. 产品概述与化学特性

4-氯-5-氟-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶-6-羧酸 (CAS 号: 1246088-38-9) 是一种杂环羧酸类化合物, 分子式为  $C_8H_4ClFN_2O_2$ , 分子量为 214.581。该化合物以白色至类白色固体形式存在, 纯度  $\geq 96\%$ , 结构中含有氯、氟取代基及吡咯并吡啶骨架, 具有显著的电子效应和空间位阻, 适合作为有机合成中间体或药物分子砌块。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其独特的杂环结构, 在生物活性分子设计中具有重要价值。吡咯并吡啶骨架常见于多种激酶抑制剂和抗肿瘤药物中, 而氯、氟原子的引入可调节分子的脂溶性和靶标结合能力。其羧酸基团为后续衍生化 (如酰胺化、酯化) 提供了关键反应位点, 在药物化学中常用于先导化合物的结构优化。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

- 医药研发: 作为核心片段用于合成小分子激酶抑制剂 (如 EGFR、ALK 抑制剂), 尤其在抗肿瘤和抗炎药物开发中具有潜力。
- 材料科学: 可作为配体参与金属有机框架 (MOF) 材料的构建。
- 学术研究: 用于杂环化合物反应机理探索及新反应开发。

#### 4. 储存条件与使用建议

- 储存条件: 建议密封保存于  $-20^{\circ}C$  干燥环境中, 避免光照和潮湿。长期储存需充惰性气体保护。
- 使用建议: 称取时需在干燥环境下操作, 避免与强氧化剂接触。溶解性测试表明其可溶于 DMSO、DMF 等极性有机溶剂, 水溶性较差, 建议先以少量有机溶剂助溶后再稀释。

#### 5. 质量控制与安全信息

- 质量控制: 通过 HPLC 测定纯度 ( $\geq 96\%$ ), 辅以  $^1H$  NMR 和质谱进行结构确证。
- 安全信息: 本品对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时需佩戴防护手套、护目镜及实验

服。若接触皮肤，立即用大量清水冲洗。废弃物应按照危险化学品规范处置。

- 运输分类：非危险品，但建议作为化学品常规运输。

注：本产品仅供科研用途，不适用于医药、食品或家庭使用。具体应用前请查阅最新文献并评估合规性。