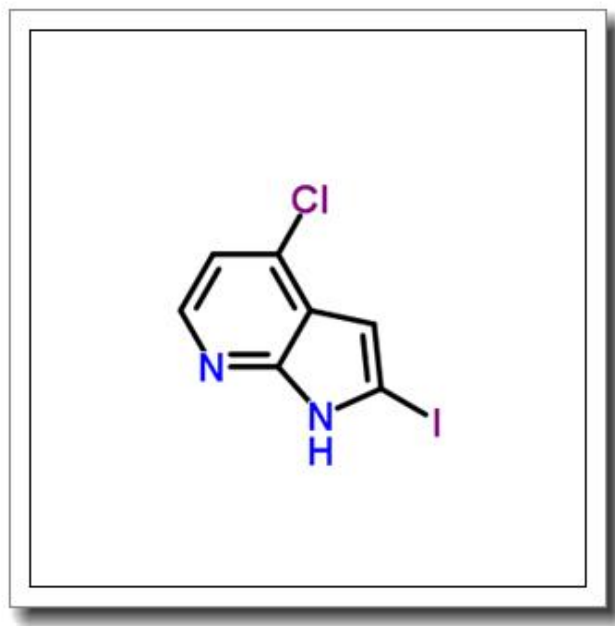


4-氯-2-碘-1H-吡咯[2,3-B]吡啶

4-Chloro-2-iodo-7-azaindole



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-Chloro-2-iodo-7-azaindole
中文名称	4-氯-2-碘-1H-吡咯[2,3-B]吡啶
CAS 号	940948-29-8
分子式	C ₇ H ₄ ClIN ₂
分子量	278.478
纯度	≥ 96%

产品说明

4-氯-2-碘-1H-吡咯[2,3-B]吡啶产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-氯-2-碘-1H-吡咯[2,3-B]吡啶 (CAS 号: 940948-29-8) 是一种含卤素取代的氮杂吡啶衍生物, 化学名称为 4-Chloro-2-iodo-7-azaindole, 分子式为 $C_7H_4ClIN_2$, 分子量 278.478。本品为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有显著的芳香杂环结构特征, 其碘和氯原子的引入增强了分子反应活性, 适用于多种偶联反应和药物修饰。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为 7-氮杂吡啶类骨架的核心衍生物, 在药物化学中具有重要价值。其结构中的卤素位点 (碘和氯) 可作为关键官能团参与过渡金属催化反应 (如 Buchwald-Hartwig 胺化、Suzuki 偶联等), 广泛应用于激酶抑制剂、抗肿瘤及抗病毒药物的中间体合成。此外, 氮杂吡啶结构可模拟嘌呤碱基, 在核苷类似物开发中发挥重要作用。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发和有机合成领域, 具体包括:

- 3.1 作为关键中间体用于合成靶向抗癌药物 (如 ALK 或 JAK 激酶抑制剂)。
- 3.2 在荧光探针设计中作为骨架结构, 用于生物分子标记与检测。
- 3.3 参与 C-C/C-N 键偶联反应, 构建复杂杂环化合物。

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存条件: 需避光、密封保存于 $-20^{\circ}C$ 干燥环境中, 长期储存建议充入惰性气体 (如氮气)。
- 4.2 使用建议: 操作时需在通风橱中进行, 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)、二氯甲烷等有机溶剂, 推荐使用前进行氮气保护下的溶解处理。

5. 质量控制与安全信息

5.1 质量控制：通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，批次间提供核磁共振（ $^1\text{H NMR}$ ）和质谱（MS）数据验证。

5.2 安全信息：本品对眼睛和呼吸道有刺激性，需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。若接触皮肤，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地危险化学品法规。

（注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件进一步优化。）