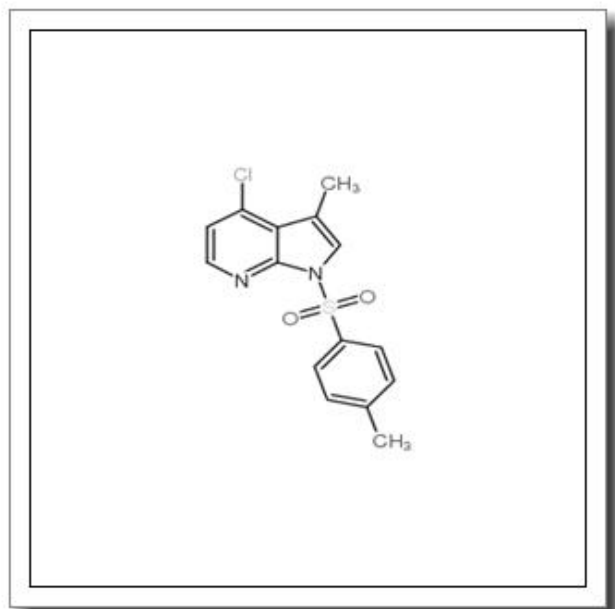


# 4-氯-3-甲基-1-[(4-甲基苯基)磺酰基]- 1H-吡咯并[2,3-b]吡啶

*1-(1-benzylazetidin-3-yl)piperidine-4-carboxylic acid*



## 产品基本信息

| 属性    | 值  |
|-------|--|
| 化学名称  | 1-(1-benzylazetidin-3-yl)piperidine-4-carboxylic acid                          |
| 中文名称  | 4-氯-3-甲基-1-[(4-甲基苯基)磺酰基]-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶                                       |
| CAS 号 | 869335-18-2  |
| 分子式   | C <sub>15</sub> H <sub>13</sub> C <sub>1</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub> S |
| 分子量   | 320.794  |
| 纯度    | ≥96%   |

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

本产品为 1-(1-苄基氮杂环丁烷-3-基)哌啶-4-羧酸衍生物，中文名称为 4-氯-3-甲基-1-[(4-甲基苯基)磺酰基]-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶，CAS 号为 869335-18-2。其分子式为 C<sub>15</sub>H<sub>13</sub>C<sub>1</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>S，分子量为 320.794，纯度 ≥96%。该化合物是一种含氮杂环磺酰化衍生物，具有独特的吡咯并吡啶骨架结构，兼具芳香性和极性官能团特性，在有机溶剂中溶解性良好，但在水中溶解度较低。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为小分子抑制剂或中间体，在药物化学研究中具有重要价值。其结构中的磺酰基和氯甲基可参与亲核取代反应，而吡咯并吡啶骨架能与生物靶标（如激酶或受体）产生特异性相互作用。这类结构常见于抗肿瘤、抗炎或中枢神经系统药物的先导化合物开发中，尤其在蛋白激酶抑制剂设计中表现出潜在活性。

### 3. 主要应用领域与具体用途

主要用于医药研发领域，具体包括：作为激酶抑制剂研究的核心骨架；用于构建靶向抗癌药物的结构修饰；在有机合成中作为关键中间体，进一步衍生化制备复杂杂环化合物。实验室应用中，需通过核磁共振（NMR）和质谱（MS）验证其结构，并通过高效液相色谱（HPLC）监控反应进程。

### 4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光干燥储存，长期保存需充惰性气体保护。开封后需密封防潮，避免反复冻融。使用时应在通风橱中操作，佩戴防护手套和护目镜。溶解推荐使用二甲基亚砜（DMSO）或二氯甲烷，工作浓度需根据实验体系优化。

### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 验证纯度 ≥96%，重金属含量低于 10 ppm。安全数据表明，该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应避免直接接触。如发生泄漏，需用惰性吸附材料处理并按规定处置废弃物。毒理学数据尚未完全明确，建议遵循实验室化学品通用防护标准，并在生物活性实验中谨慎评估其细胞毒性。

注：以上信息基于现有研究数据，具体应用需结合实验目的进一步验证。