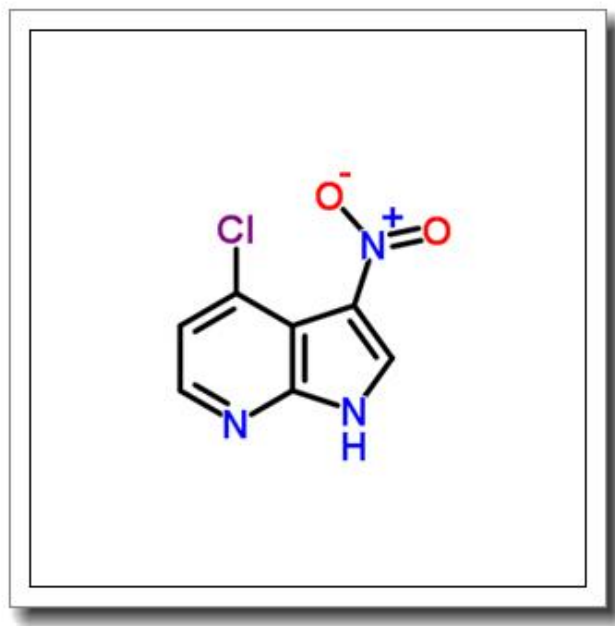


# 4-氯-3-硝基-1H-吡咯并[2,3-B]吡啶

*4-chloro-3-nitro-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	4-chloro-3-nitro-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine
中文名称	4-氯-3-硝基-1H-吡咯并[2,3-B]吡啶
CAS 号	918519-53-6
分子式	C7H4ClN3O2
分子量	197.579
纯度	≥96%

## 产品说明

### 4-氯-3-硝基-1H-吡咯并[2,3-B]吡啶产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本品为淡黄色至黄色结晶性粉末，化学名称为 4-chloro-3-nitro-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine，CAS 号 918519-53-6，分子式  $C_7H_4ClN_3O_2$ ，分子量 197.579。其结构中包含吡咯并吡啶母核，氯和硝基官能团分别位于 4 位和 3 位，赋予其独特的电子效应和反应活性。纯度  $\geq 96\%$  (HPLC)，熔点为 185-188° C (分解)，可溶于二甲基亚砜 (DMSO)、二氯甲烷等有机溶剂，微溶于水。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物是重要的杂环芳香族中间体，其硝基和氯原子可作为活性位点参与亲核取代、还原胺化等反应。吡咯并吡啶骨架广泛存在于药物活性分子中，具有调节激酶抑制、抗肿瘤等生物活性潜力。在药物研发领域，常用于构建靶向 EGFR、ALK 等酪氨酸激酶抑制剂的先导化合物。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药中间体合成，具体包括：

- 抗肿瘤药物研发：作为小分子抑制剂的核心片段，用于修饰优化药效团。
- 有机合成：通过硝基还原或氯取代反应制备氨基衍生物、醚类衍生物等。
- 材料科学：用于合成具有光电性能的共轭聚合物前体。

#### 4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，避光、防潮，建议温度 -20° C 至 4° C 长期保存。使用前需恢复至室温并干燥处理。操作时需在通风橱中进行，避免吸入粉尘或接触皮肤。建议佩戴防护手套、护目镜及实验服。溶解性测试推荐优先使用 DMSO，工作浓度需根据实验体系优化。

#### 5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC、NMR 和质谱验证结构，批次间稳定性可控。安全数据：急性毒性 (LD50, 大鼠口服) 未明确，但需按有害化学品处理。避免与强氧化剂、强酸强碱

接触。废弃处置应遵守当地法规。如意外接触眼睛或皮肤，立即用大量清水冲洗并就医。

（注：本说明基于现有实验数据，实际应用前请查阅最新文献并开展预实验验证。）