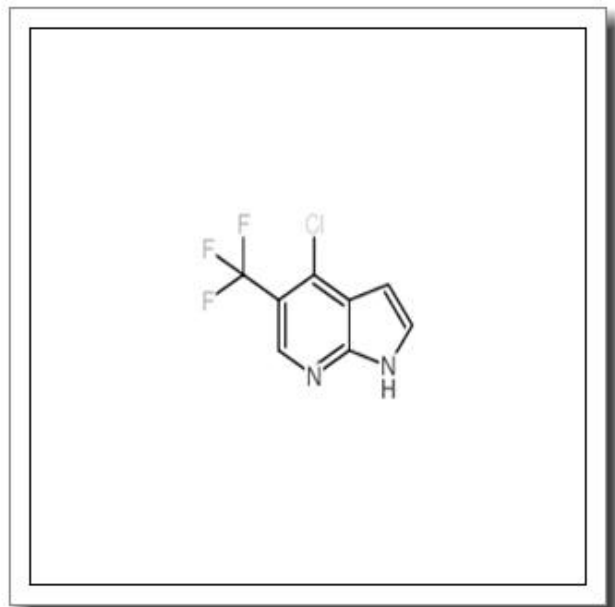


# 4-氯-5-(三氟甲基)-1H-吡咯并[2,3-B]吡啶

*4-Chloro-5-(trifluoromethyl)-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	4-Chloro-5-(trifluoromethyl)-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine
中文名称	4-氯-5-(三氟甲基)-1H-吡咯并[2,3-B]吡啶
CAS 号	1196507-58-0
分子式	C <sub>8</sub> H <sub>4</sub> ClF <sub>3</sub> N <sub>2</sub>
分子量	220.579
纯度	≥96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

4-氯-5-(三氟甲基)-1H-吡咯并[2,3-B]吡啶 (CAS 号: 1196507-58-0) 是一种含氯和三氟甲基取代的吡咯并吡啶类化合物, 分子式为  $C_8H_4ClF_3N_2$ , 分子量为 220.579。该化合物为白色至类白色固体, 纯度不低于 96%, 具有显著的芳香杂环结构特征。其化学结构中氯原子和三氟甲基的引入增强了分子的反应活性和电子效应, 使其在有机合成和药物化学中具有重要价值。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为吡咯并吡啶类衍生物, 其结构核心广泛存在于多种生物活性分子中, 尤其在激酶抑制剂和抗肿瘤药物的研发中表现突出。三氟甲基的强吸电子特性可调节分子的脂溶性和代谢稳定性, 而氯原子则为后续官能团化提供了反应位点。这类结构在调节细胞信号通路和酶活性方面具有潜在作用, 是药物先导化合物优化的重要中间体。

### 3. 主要应用领域与具体用途

4-氯-5-(三氟甲基)-1H-吡咯并[2,3-B]吡啶主要用于医药研发领域, 特别是在小分子靶向药物的合成中。其具体用途包括: 作为激酶抑制剂的关键中间体, 用于构建抗肿瘤或抗炎药物分子骨架; 在农药化学中用于开发高效低毒的新型杀虫剂; 此外, 还可作为有机合成中的砌块, 用于复杂杂环体系的构建。

### 4. 储存条件与使用建议

该化合物需避光保存于干燥、密闭的容器中, 推荐储存温度为 2-8°C, 长期保存建议充入惰性气体保护。使用时应穿戴防护手套、护目镜及实验服, 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, 但在水中溶解度较低, 建议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

本产品通过高效液相色谱 (HPLC) 检测, 纯度  $\geq 96\%$ , 并提供详细的质量分析证书 (COA)。其危险特性包括刺激性, 可能引起皮肤、眼睛和呼吸道不适。操作时应

在通风良好的化学通风橱中进行，避免形成粉尘。废弃物处置需符合当地环保法规，不可直接排入下水道。如发生意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。

以上信息仅供参考，具体实验设计请结合文献和实际需求进行。