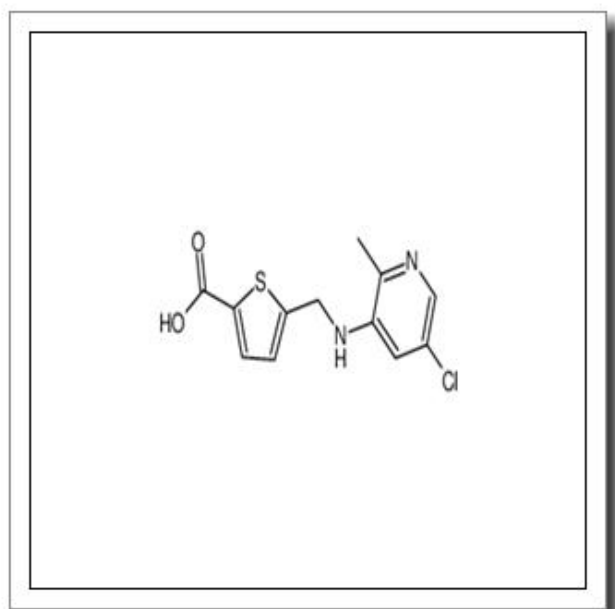


5-(((5-氯-2-甲基吡啶-3-基)氨基)甲基)噻吩-2-羧酸

5-[[(5-chloro-2-methyl-3-pyridinyl) amino]methyl]-2-thiophenecarboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-[[(5-chloro-2-methyl-3-pyridinyl) amino]methyl]-2-thiophenecarboxylic acid
中文名称	5-(((5-氯-2-甲基吡啶-3-基)氨基)甲基)噻吩-2-羧酸
CAS 号	1404456-63-8
分子式	C ₁₂ H ₁₁ ClN ₂ O ₂ S
分子量	282.746
纯度	≥96%

产品说明

5-((5-氯-2-甲基吡啶-3-基)氨基)甲基)噻吩-2-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 5-[[(5-chloro-2-methyl-3-pyridinyl) amino]methyl]-2-thiophenecarboxylic acid，分子式 C₁₂H₁₁ClN₂O₂S，分子量 282.746，CAS 登记号 1404456-63-8。其结构中同时包含吡啶环、噻吩环及羧酸官能团，赋予其独特的酸碱两性及配位能力。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，溶解性测试显示易溶于 DMSO、甲醇等极性有机溶剂，微溶于水（pH 依赖性）。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为杂环衍生物，其吡啶-噻吩杂化骨架可特异性结合金属离子及生物靶点，尤其是含锌酶类。羧酸基团提供分子修饰位点，使其在药物化学中成为关键中间体，常用于构建激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂的药效团。其氯代甲基吡啶结构域能增强细胞膜穿透性，提升生物利用度。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域，本品主要用于以下方向：一是作为抗肿瘤候选药物的核心片段，通过抑制 VEGFR 或 PDGFR 信号通路发挥作用；二是在神经科学研究中用于设计 AMPA 受体变构调节剂；三是在农药化学中作为杀菌剂先导化合物的结构单元。实验室级产品适用于高通量筛选、结构-活性关系（SAR）研究及小分子探针开发。

4. 储存条件与使用建议

建议长期储存于-20℃惰性气体（如氩气）保护环境中，短期使用可存放于 2-8℃干燥避光处。开封后需充氮密封，避免反复冻融。工作溶液建议现配现用，溶剂优先选择无水 DMSO（浓度 ≤10mM），水相体系需调节 pH 至 7.0-7.4 以维持稳定性。操作时需在通风橱中进行，避免直接接触皮肤。

5. 质量控制与安全信息

批次质检报告包含 HPLC 纯度（≥96%）、LC-MS 分子量验证及重金属残留

(≤ 10 ppm) 数据。本品属于刺激性化学品, CAS 号 1404456-63-8 未列入剧毒物质名录, 但仍需遵守 GHS 分类: H315 (造成皮肤刺激)、H319 (造成严重眼刺激)。应急处理时如接触眼睛, 需立即用生理盐水冲洗 15 分钟并就医。废弃物处置应参照当地有机卤化物处理法规。

注: 本说明基于现有研究数据编制, 具体应用需结合实验体系优化条件。更多技术参数可索取 COA 文件。