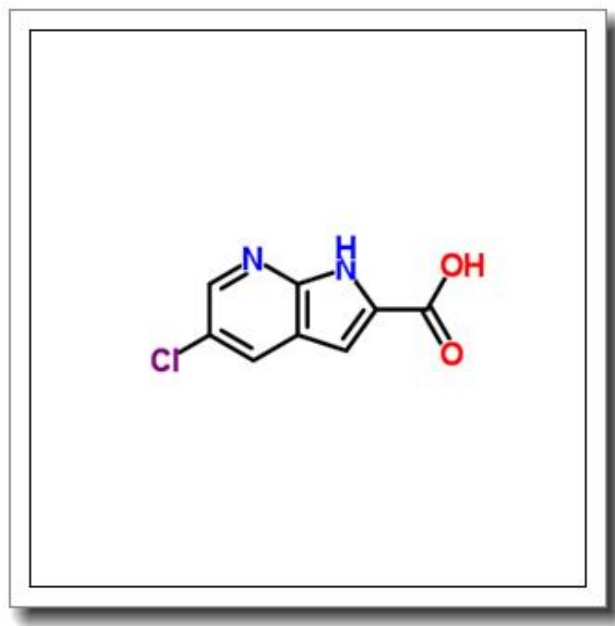


5-氯-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶-2-甲酸

5-Chloro-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine-2-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-Chloro-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine-2-carboxylic acid
中文名称	5-氯-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶-2-甲酸
CAS 号	800401-84-7
分子式	C ₈ H ₅ ClN ₂ O ₂
分子量	196.59
纯度	≥96%

产品说明

5-氯-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶-2-甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-氯-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶-2-甲酸 (CAS 号: 800401-84-7) 是一种杂环羧酸化合物, 分子式为 $C_8H_5ClN_2O_2$, 分子量为 196.59。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在, 纯度 $\geq 96\%$, 具有吡咯并吡啶骨架结构, 其 5 位氯取代基和 2 位羧酸基团赋予其独特的化学反应性。该物质微溶于水, 易溶于极性有机溶剂如 DMSO 和甲醇, 需避光保存以避免降解。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡咯并吡啶类衍生物, 该化合物是构建复杂生物活性分子的关键中间体。其结构中的氯原子和羧酸基团可作为修饰位点, 用于合成激酶抑制剂、抗肿瘤药物或抗菌剂。吡咯并吡啶骨架广泛存在于药物分子中, 能够与生物靶标 (如 ATP 结合位点) 特异性结合, 因此在药物研发领域具有重要价值。

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。在药物化学中, 它是合成抗肿瘤化合物 (如 CDK 抑制剂) 和抗病毒药物的前体; 在材料科学中, 可用于制备功能化杂环材料。具体用途包括: 作为配体参与金属催化反应、通过羧基衍生化制备酰胺或酯类衍生物、以及作为结构单元用于高通量筛选库的构建。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、干燥惰性气体 (如氩气) 环境下长期储存, 短期使用可置于 $2-8^{\circ}C$ 避光保存。开封后需充氮密封, 防止吸湿和氧化。使用时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩, 在通风橱中操作。溶解时优先选用 DMSO 或碱性水溶液 ($pH > 8$), 避免与强氧化剂接触。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 批次间一致性通过 1H NMR 和质谱验证。安全数据表明, 该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性 (GHS 分类: 刺激性类别 2), 操作后

需彻底清洗暴露部位。废弃物应作为有害化学品处理，不可直接排放。提供完整的COA（分析证书）和MSDS（材料安全数据表）备案。

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优化。建议用户在使用前查阅最新文献并开展小规模预实验。