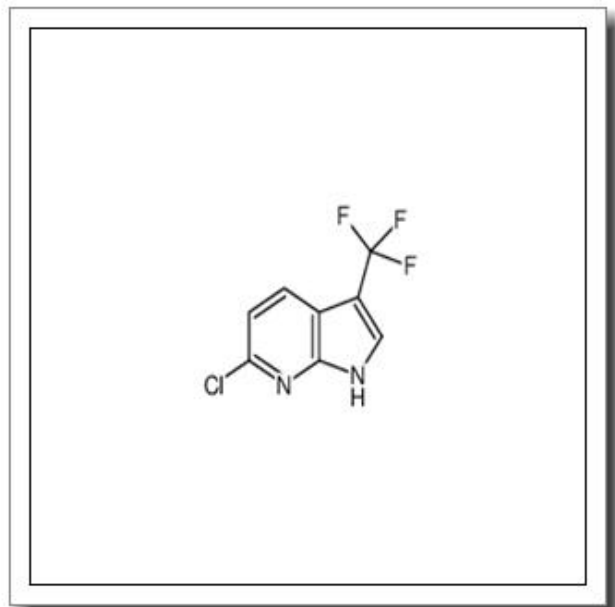


# 6-氯-3-(三氟甲基)-1H-吡咯并[2,3-B]吡啶

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



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	6-Chloro-3-(trifluoromethyl)-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine
中文名称	6-氯-3-(三氟甲基)-1H-吡咯并[2,3-B]吡啶
CAS 号	932406-36-5
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

### 6-氯-3-(三氟甲基)-1H-吡咯并[2,3-B]吡啶产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

6-氯-3-(三氟甲基)-1H-吡咯并[2,3-B]吡啶 (CAS 号: 932406-36-5) 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结晶性粉末, 纯度  $\geq 96\%$ , 具有较高的化学稳定性和良好的溶解性, 可溶于常见有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇。其独特的杂环结构赋予其显著的电子效应和空间位阻, 使其在药物化学和材料科学中具有重要价值。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为杂环芳香族衍生物, 其吡咯并吡啶骨架是多种生物活性分子的核心结构。三氟甲基和氯原子的引入可显著调节其脂溶性和电负性, 从而影响与靶标蛋白的相互作用。在药物研发中, 此类结构常作为激酶抑制剂或受体调节剂的关键中间体, 尤其在抗肿瘤和抗炎药物设计中具有潜在应用价值。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

6-氯-3-(三氟甲基)-1H-吡咯并[2,3-B]吡啶主要用于医药和农药领域的合成研究。在医药领域, 它是构建小分子抑制剂的重要砌块, 可用于开发针对特定激酶 (如 JAK 或 ALK) 的候选药物。在农药化学中, 其结构可作为新型杀虫剂或杀菌剂的活性组分。此外, 该化合物还可用于有机发光材料 (OLED) 的合成研究。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光条件下储存, 温度控制在  $2-8^{\circ}C$ , 长期保存需置于惰性气体 (如氩气) 环境中。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解时建议优先选用 DMSO, 配制溶液后需尽快使用或分装冻存以避免降解。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度  $\geq 96\%$ , 并提供完整的质谱 (MS) 和核磁共振 (NMR) 数据以确证结构。安全信息方面, 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性,

操作时需佩戴防护手套、护目镜和防尘口罩。若不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。

——本产品仅限科研用途，不可用于人体或动物实验——