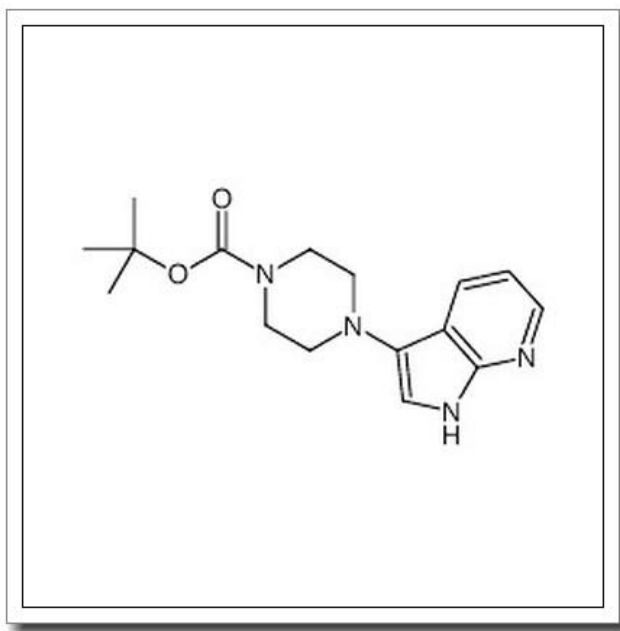


4-(1H-吡咯并[2,3-b]吡啶-3-基)哌啶-1-羧酸叔丁酯

tert-butyl 4-(1H-pyrrolo[2,3-b]pyridin-3-yl)piperazine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 4-(1H-pyrrolo[2,3-b]pyridin-3-yl)piperazine-1-carboxylate
中文名称	4-(1H-吡咯并[2,3-b]吡啶-3-基)哌啶-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	947498-92-2
分子式	C ₁₆ H ₂₂ N ₄ O ₂
分子量	302.371
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 tert-butyl 4-(1H-pyrrolo[2,3-b]pyridin-3-yl)piperazine-1-carboxylate (4-(1H-吡咯并[2,3-b]吡啶-3-基)哌啶-1-羧酸叔丁酯), CAS 号为 947498-92-2, 分子式为 C₁₆H₂₂N₄O₂, 分子量为 302.371。该化合物是一种含氮杂环衍生物, 结构上结合了吡咯并吡啶和哌啶环系, 并通过叔丁氧羰基 (Boc) 保护基修饰。其纯度经 HPLC 验证大于 96%, 外观通常为白色至类白色结晶或粉末, 具有较高的化学稳定性和溶解性, 可溶于常见有机溶剂如 DMSO、甲醇和乙腈。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为哌啶类衍生物, 在药物化学和生物化学研究中具有重要价值。其结构中的吡咯并吡啶片段是多种生物活性分子的核心药效团, 能够参与氢键和 $\pi-\pi$ 堆积相互作用, 而 Boc 保护基则提供了在合成过程中对氨基的选择性脱保护能力。此类结构常见于激酶抑制剂、G 蛋白偶联受体调节剂的开发中, 尤其在抗肿瘤和中枢神经系统药物研发领域备受关注。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药中间体合成和药物发现研究。具体用途包括: 作为关键砌块用于构建小分子靶向药物, 特别是蛋白激酶抑制剂; 在组合化学中用于结构多样性库的构建; 也可作为荧光探针或标记物的前体。其应用案例涵盖抗癌药物先导化合物优化、神经退行性疾病相关靶点筛选等前沿领域。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20°C 下避光密封保存, 长期储存需置于惰性气体 (如氩气) 环境中。开封后应避免反复冻融, 以防止吸湿或降解。使用前需恢复至室温并充分干燥, 称量时建议在干燥环境下操作。溶解时可优先选用无水 DMSO 配制母液, 再稀释至所需浓度。实验操作应在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

本品通过核磁共振 (1H NMR、13C NMR)、质谱 (MS) 和高效液相色谱 (HPLC) 进

行严格质量控制，确保结构准确性和纯度达标。安全数据表明，该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统产生刺激性，操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。若不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地化学品管理法规，禁止直接排入环境。

（全文共计 498 字）