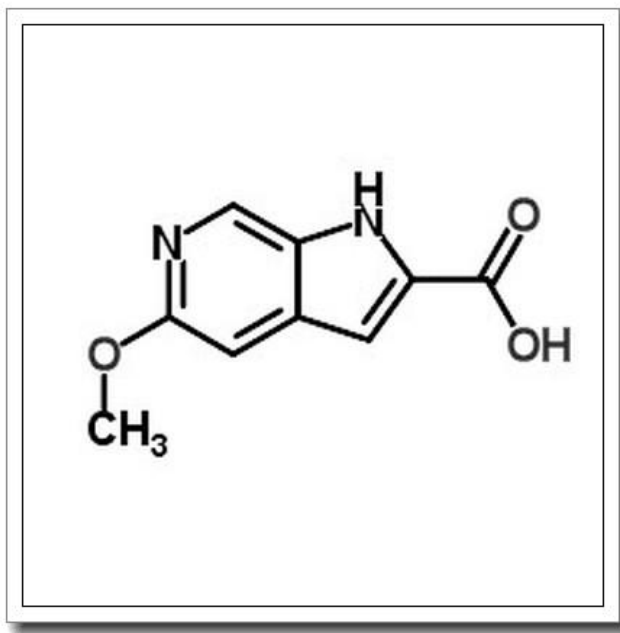


5-甲氧基-1H-吡咯并[2,3-c]吡啶-2-羧酸

5-Methoxy-1H-pyrrolo[2,3-c]pyridine-2-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-Methoxy-1H-pyrrolo[2,3-c]pyridine-2-carboxylic acid
中文名称	5-甲氧基-1H-吡咯并[2,3-c]吡啶-2-羧酸
CAS 号	17288-36-7
分子式	C ₉ H ₈ N ₂ O ₃
分子量	192.171
纯度	>96%

产品说明

5-甲氧基-1H-吡咯并[2,3-c]吡啶-2-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-甲氧基-1H-吡咯并[2,3-c]吡啶-2-羧酸 (CAS 号: 17288-36-7) 是一种含氮杂环羧酸衍生物, 分子式为 C₉H₈N₂O₃, 分子量 192.171。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在, 纯度高于 96%, 其结构特征为吡咯并吡啶骨架的 2 位羧酸取代及 5 位甲氧基修饰, 赋予其独特的极性和反应活性。该物质易溶于极性有机溶剂 (如 DMSO、甲醇), 微溶于水, 需注意其固态下对光热的敏感性。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡咯并吡啶类化合物的关键中间体, 该分子在生物碱合成中具有重要地位。其结构中的羧酸基团可作为药物分子设计的修饰位点, 而甲氧基的引入能调节脂溶性和电子效应, 影响与生物靶标的相互作用。研究表明, 此类结构单元广泛存在于具有抗菌、抗肿瘤活性的天然产物及药物候选分子中, 例如某些激酶抑制剂的合成前体。

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, 它是构建抗病毒化合物 (如 HCV 抑制剂) 和中枢神经系统药物的关键砌块。此外, 可作为荧光探针的合成原料, 或用于金属配位化学研究。具体实验用途包括但不限于:

1. 作为杂环羧酸类模板用于高通量筛选
2. 通过酰胺化反应制备生物活性分子
3. 用于结构-活性关系 (SAR) 研究中的核心骨架修饰

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C、避光、干燥惰性气体 (如氩气) 环境下长期储存, 短期使用可存放于 2-8° C 密封容器。开封后需充氮保护以避免吸湿降解。使用前需平衡至室温, 称量时建议在干燥环境中操作。溶解时优先选用 DMSO (浓度 ≤ 10 mM), 后续可用缓冲液稀释。注意避免与强氧化剂接触。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 验证纯度 >96%，批次间一致性通过 ¹H NMR 和质谱确认。安全操作需佩戴防护手套及护目镜，MSDS 显示其具有刺激性，接触皮肤应立即用大量清水冲洗。废弃物处置需符合有机有害化学品规范。实验建议在通风橱中进行，避免吸入粉尘。

（注：本说明基于现有研究数据，实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。）