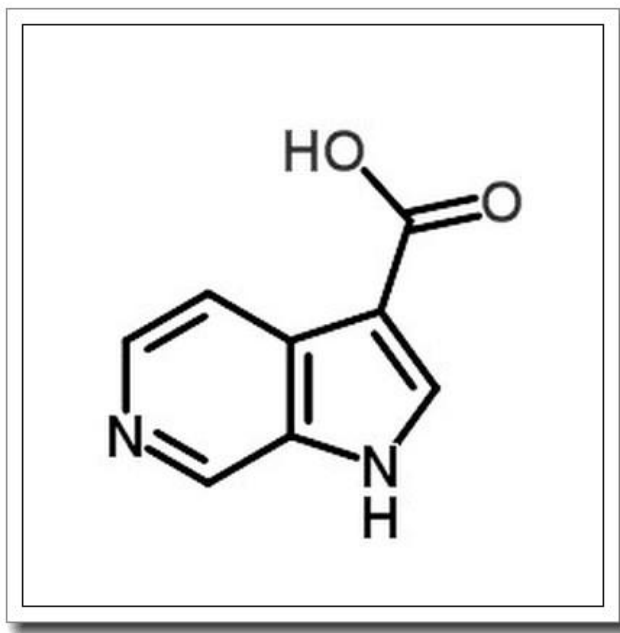


6-氮杂吲哚-3-甲酸

1H-Pyrrolo[2,3-c]pyridine-3-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	1H-Pyrrolo[2,3-c]pyridine-3-carboxylic acid
中文名称	6-氮杂吲哚-3-甲酸
CAS 号	67058-74-6
分子式	C ₈ H ₆ N ₂ O ₂
分子量	162.145
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1H-Pyrrolo[2,3-c]pyridine-3-carboxylic acid (6-氮杂吡啶-3-甲酸) 是一种杂环羧酸化合物, CAS 号为 67058-74-6, 分子式为 C₈H₆N₂O₂, 分子量为 162.145。该化合物由吡咯并吡啶骨架和羧酸官能团构成, 呈现白色至类白色结晶粉末形态, 纯度高于 96%。其结构中氮原子的存在赋予其独特的电子分布特性, 使其在有机合成和药物化学中具有重要价值。该化合物易溶于极性有机溶剂 (如 DMSO、甲醇), 微溶于水, 需在特定 pH 条件下溶解。

2. 生物化学功能与重要性

6-氮杂吡啶-3-甲酸是吡啶类生物碱的结构类似物, 可作为杂环砌块用于构建复杂生物活性分子。其吡啶并吡咯骨架与多种酶活性位点具有亲和性, 常作为激酶抑制剂或受体调节剂的中间体。羧酸基团提供了进一步的衍生化位点, 便于通过酰胺化或酯化反应引入功能基团。该化合物在药物研发中常用于优化先导化合物的溶解性、靶标结合力或代谢稳定性。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应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、抗炎及中枢神经系统药物的重要中间体, 例如用于 JAK 激酶抑制剂或 5-HT 受体调节剂的制备。在材料科学中, 可作为配体参与金属有机框架 (MOF) 的构建。此外, 也用于荧光探针或生物标记物的开发, 因其刚性结构能有效调控荧光发射波长。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C、避光、干燥条件下长期储存, 短期使用可置于 4° C 环境。开封后需充入惰性气体 (如氮气) 保护, 防止吸湿氧化。使用前需恢复至室温以避免冷凝水影响。溶解时推荐先用 DMSO 配制成母液, 再稀释至工作浓度。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

本产品通过 HPLC 检测纯度 ≥96%, 并提供 COA (质量分析证书)。核磁共振

(NMR) 和质谱 (MS) 数据可应要求提供。根据 GHS 分类, 该化合物可能造成皮肤刺激 (H315) 和眼睛刺激 (H319), 操作时需佩戴防护手套、护目镜及实验服。如意外接触, 立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应作为有害化学品处置, 遵守当地环保法规。