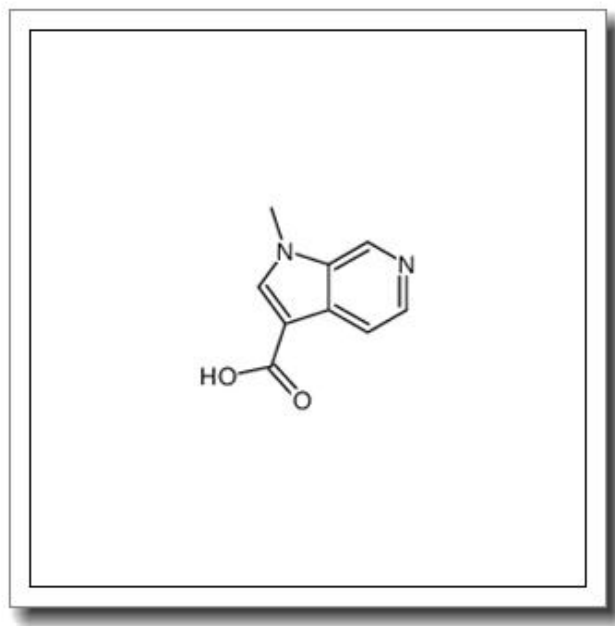


1-甲基-1H-吡咯并[2,3-c]吡啶-3-羧酸

1-methylpyrrolo[2,3-c]pyridine-3-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-methylpyrrolo[2,3-c]pyridine-3-carboxylic acid
中文名称	1-甲基-1H-吡咯并[2,3-c]吡啶-3-羧酸
CAS 号	1394175-19-9
分子式	C ₉ H ₈ N ₂ O ₂
分子量	176.172
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-甲基-1H-吡咯并[2,3-c]吡啶-3-羧酸 (CAS 号: 1394175-19-9) 是一种杂环羧酸化合物, 分子式为 $C_9H_8N_2O_2$, 分子量为 176.172。该化合物由吡咯并吡啶骨架与羧酸基团构成, 具有显著的芳香性和极性, 可溶于多种有机溶剂如甲醇、二甲基亚砜 (DMSO), 微溶于水。其纯度 $\geq 96\%$, 外观通常为白色至类白色结晶或粉末, 需通过高效液相色谱 (HPLC) 或核磁共振 (NMR) 验证结构。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡咯并吡啶类衍生物, 该化合物在药物化学中具有重要价值。其结构中的羧酸基团可作为关键药效团, 参与氢键形成或金属离子配位, 而吡啶环则可能增强与生物靶点的相互作用。此类结构常见于激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体 (GPCR) 调节剂的开发中, 尤其在抗肿瘤和中枢神经系统药物研究中备受关注。

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及新药研发领域。具体用途包括:

- 作为小分子抑制剂的核心骨架, 用于优化先导化合物的活性与选择性。
- 参与偶联反应 (如酰胺化、酯化) 以构建更复杂的药物分子。
- 在化学生物学研究中作为探针或标记物的前体。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光干燥储存, 长期保存需充惰性气体保护。开封后需密封防潮, 避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解推荐使用 DMSO 或乙醇, 配制溶液后建议分装并尽快使用, 以防降解。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 验证纯度, 并提供质谱 (MS) 和核磁数据以确证结构。安全信息如下:

- 安全术语: 可能引起皮肤或眼睛刺激, 操作时避免吸入粉尘。

- 风险提示: 非人体接触用途, 仅限科研使用。废弃处置需符合当地法规。
- 紧急处理: 如接触皮肤, 立即用大量清水冲洗并就医。

(全文共计 436 字)