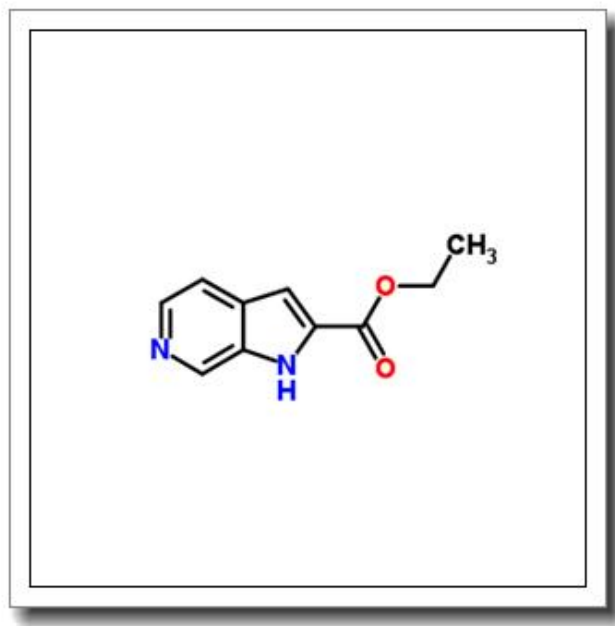


1H-吡咯并[2,3-c]吡啶-2-羧酸乙酯

ethyl 1H-pyrrolo[2,3-c]pyridine-2-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 1H-pyrrolo[2,3-c]pyridine-2-carboxylate
中文名称	1H-吡咯并[2,3-c]吡啶-2-羧酸乙酯
CAS 号	24334-19-8
分子式	C10H10N2O2
分子量	190.199
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为 ethyl 1H-pyrrolo[2,3-c]pyridine-2-carboxylate (1H-吡咯并[2,3-c]吡啶-2-羧酸乙酯), CAS 号 24334-19-8, 分子式 C₁₀H₁₀N₂O₂, 分子量 190.199, 是一种杂环羧酸酯类化合物。其结构包含吡咯并吡啶骨架和乙酯基团, 常温下通常为白色至类白色结晶或粉末, 纯度 ≥96%。该化合物具有中等极性, 可溶于常见有机溶剂如甲醇、乙醇、二甲基亚砜 (DMSO), 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡咯并吡啶衍生物, 该化合物是构建复杂杂环结构的重要中间体, 尤其在药物化学领域具有显著价值。其分子中的吡啶氮原子和酯基可参与多种亲核取代、缩合及环化反应, 常用于合成具有生物活性的靶向分子, 如激酶抑制剂或神经递质调节剂。此外, 其刚性杂环结构有助于增强衍生化合物的代谢稳定性和靶标结合能力。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药研发和有机合成领域。在药物开发中, 常用于抗肿瘤、抗炎或中枢神经系统药物先导化合物的结构修饰。具体用途包括:

- 作为关键中间体用于合成小分子抑制剂
- 参与多步反应构建含氮稠环体系
- 在荧光标记物或配体设计中作为核心骨架

实验室研究中需根据具体反应条件优化投料比例, 建议参考相关文献或进行预实验。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 避光、防潮, 推荐温度 -20° C 至 4° C 长期保存。开封后需充惰性气体保护以避免降解。使用前需恢复至室温并充分干燥, 称量时避免接触金属器具。建议在通风橱中操作, 佩戴防护手套、护目镜及实验服。溶解性测试表明, 推荐使用无水乙醇或 DMSO 配制母液 (浓度 ≤50 mM), 现配现用。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，水分含量 $\leq 0.5\%$ ，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明，其急性毒性（LD50）属中等危害类别，可能引起眼睛和皮肤刺激。意外接触时需立即用大量清水冲洗，必要时就医。废弃物处理应遵循当地法规，不可直接排入下水道。运输时归类为普通化学品，但需避免与强氧化剂共存。

注：具体实验方案请结合最新文献，本说明基于现有数据提供通用指导，实际性能可能因应用场景而异。