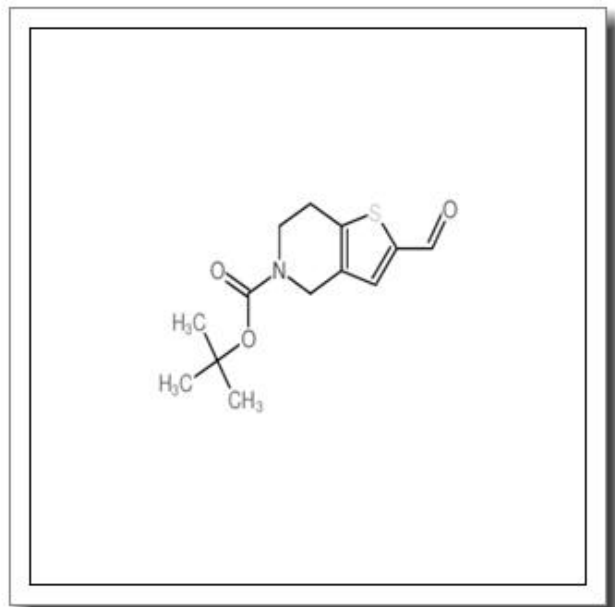


# 2-甲酰基-6,7-二氢噻吩并[3,2-c]吡啶-5(4h)-羧酸叔丁酯

*tert-butyl 2-formyl-6,7-dihydro-4H-thieno[3,2-c]pyridine-5-carboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 2-formyl-6,7-dihydro-4H-thieno[3,2-c]pyridine-5-carboxylate
中文名称	2-甲酰基-6,7-二氢噻吩并[3,2-c]吡啶-5(4h)-羧酸叔丁酯
CAS 号	165947-55-7
分子式	C <sub>13</sub> H <sub>17</sub> N <sub>1</sub> O <sub>3</sub> S
分子量	267.344
纯度	≥96%

## 产品说明

### 2-甲酰基-6,7-二氢噻吩并[3,2-c]吡啶-5(4H)-羧酸叔丁酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 tert-butyl 2-formyl-6,7-dihydro-4H-thieno[3,2-c]pyridine-5-carboxylate, 是一种含噻吩并吡啶骨架的杂环化合物。其分子式为 C<sub>13</sub>H<sub>17</sub>N<sub>3</sub>O<sub>3</sub>S, 分子量 267.344, CAS 号为 165947-55-7。结构中的甲酰基 (-CHO) 与叔丁氧羰基 (Boc) 赋予其高反应活性, 可作为有机合成中间体参与缩合、亲核加成等反应。常温下为白色至类白色结晶或粉末, 纯度 ≥96% (HPLC)。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物是构建药物活性分子的关键砌块, 尤其适用于蛋白酶抑制剂和激酶调节剂的研发。其噻吩并吡啶核心结构具有显著的生物电子等排特性, 可模拟天然嘌呤或嘧啶碱基, 增强与靶标蛋白的结合能力。甲酰基的引入进一步扩展了衍生化潜力, 例如通过还原胺化或 Wittig 反应引入药效团。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本品主要用于以下方向:

- 3.1 抗血栓药物中间体: 作为 P2Y<sub>12</sub> 受体拮抗剂 (如替格瑞洛类似物) 的合成前体。
- 3.2 抗肿瘤化合物开发: 通过修饰吡啶环构建 CDK4/6 抑制剂的核心骨架。
- 3.3 神经科学研究: 用于制备 GABA<sub>A</sub> 受体调节剂的衍生物库。

#### 4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存条件: 密封保存于 -20°C 惰性气体 (如氩气) 环境中, 避免光照与湿气。
- 4.2 复溶建议: 使用前需恢复至室温, 建议以无水 DMSO 或 THF 为溶剂配制母液。
- 4.3 稳定性: 在干燥条件下可稳定保存 24 个月, 溶液状态需现配现用。

#### 5. 质量控制与安全信息

- 5.1 质量控制: 通过 HPLC (C<sub>18</sub> 柱, 乙腈/水梯度洗脱) 和质谱进行批次验证。
- 5.2 安全警示: 本品对眼睛和呼吸道有刺激性, 操作时需佩戴护目镜与防尘口罩。

5.3 应急处置：皮肤接触后立即用大量清水冲洗 15 分钟，若吸入需转移至通风处。

本产品仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。建议在专业化学通风橱中操作，废弃物需按危险化学品规范处置。