

5-methoxycarbonyl-1H-indole-2-carboxylic acid

5-methoxycarbonyl-1H-indole-2-carboxylic acid

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	5-methoxycarbonyl-1H-indole-2-carboxylic acid
中文名称	5-methoxycarbonyl-1H-indole-2-carboxylic acid
CAS 号	681288-76-6
分子式	C ₁₁ H ₉ N ₀₄
分子量	219.193
纯度	≥96%

产品说明

5-甲氧羰基-1H-吡啶-2-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-甲氧羰基-1H-吡啶-2-羧酸 (CAS 号: 681288-76-6) 是一种重要的吡啶类衍生物, 分子式为 $C_{11}H_9NO_4$, 分子量为 219.193。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 兼具羧酸和甲氧羰基官能团, 使其在有机合成中表现出独特的反应活性。其吡啶骨架结构赋予其良好的平面性和共轭特性, 适用于构建复杂杂环体系。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡啶类生物碱的结构类似物, 该化合物在生物活性分子设计中具有关键作用。其羧基可参与酰胺键形成, 甲氧羰基则提供酯水解或亲核取代的位点, 常用于药物先导化合物的结构修饰。在天然产物全合成中, 它是构建色氨酸衍生物和血清素受体配体的重要中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本品广泛应用于抗肿瘤、抗抑郁及神经退行性疾病相关药物的合成。具体用途包括:

- 作为激酶抑制剂的核心片段
- 用于制备吡啶-2-甲酰胺类化合物
- 在荧光探针开发中作为发色团前体

工业应用方面, 可用于有机光电材料的单体合成。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、避光、干燥条件下长期储存, 短期使用可存放于 $2-8^{\circ}C$ 环境。开封后需充惰性气体保护, 避免吸湿分解。使用时需在通风橱中操作, 建议以 DMSO 或甲醇为溶剂配制母液, 现配现用。与强氧化剂、强碱需隔离存放。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 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:

- 危害标识: H315-H319 (造成皮肤和眼刺激)
- 防护措施: 佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套
- 应急处理: 皮肤接触时立即用大量清水冲洗

废弃物处置需遵循当地危险化学品管理条例。

注: 本产品仅供科研用途, 不适用于临床或食品领域。具体实验方案建议参考文献报道的合成方法。