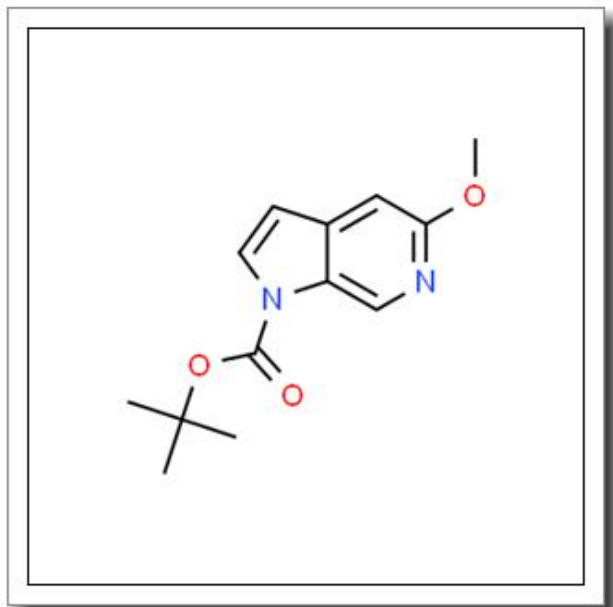


5-甲氧基-1H-吡咯并[2,3-C]吡啶-1-羧酸叔丁酯

tert-butyl 5-methoxy-1H-pyrrolo[2,3-c]pyridine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 5-methoxy-1H-pyrrolo[2,3-c]pyridine-1-carboxylate
中文名称	5-甲氧基-1H-吡咯并[2,3-C]吡啶-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	357187-17-8
分子式	C ₁₃ H ₁₆ N ₂ O ₃
分子量	248.28
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

5-甲氧基-1H-吡咯并[2,3-C]吡啶-1-羧酸叔丁酯 (CAS 号: 357187-17-8) 是一种有机杂环化合物, 分子式为 $C_{13}H_{16}N_2O_3$, 分子量为 248.28。该化合物为白色至类白色固体, 纯度 $\geq 96\%$, 结构中含有吡咯并吡啶骨架和叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团, 具有良好的化学稳定性和溶解性, 可溶于常见有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO)、甲醇和氯仿。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为吡咯并吡啶类衍生物, 在药物化学和有机合成中具有重要价值。其 Boc 保护基团可选择性脱除, 为后续修饰提供活性位点, 常用于构建复杂杂环分子或药物中间体。5-甲氧基的引入可调节分子的电子效应和空间位阻, 影响其与生物靶标的相互作用。

3. 主要应用领域与具体用途

- 药物研发: 作为关键中间体用于合成激酶抑制剂、抗肿瘤或抗病毒药物, 尤其在靶向蛋白激酶的候选化合物设计中广泛应用。
- 有机合成: 用于构建含氮杂环骨架, 或通过进一步官能团化制备功能化衍生物。
- 材料科学: 可能用于开发光电功能材料或配体设计。

4. 储存条件与使用建议

- 储存于 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 的干燥环境中, 避免光照和潮湿, 开封后需充惰性气体保护。
- 使用时需在干燥惰性气氛下操作, 避免与强酸、强氧化剂接触。建议佩戴防护手套和护目镜, 在通风橱中称量。

5. 质量控制与安全信息

- 质量控制: 通过 HPLC 和 NMR 确保纯度 $\geq 96\%$, 并提供 COA (分析证书)。
- 安全信息: 本品可能对眼睛、皮肤有刺激性, 操作时需遵守实验室安全规范。若不慎接触, 立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照国家危险化学品规定处置。

(全文共 436 字)