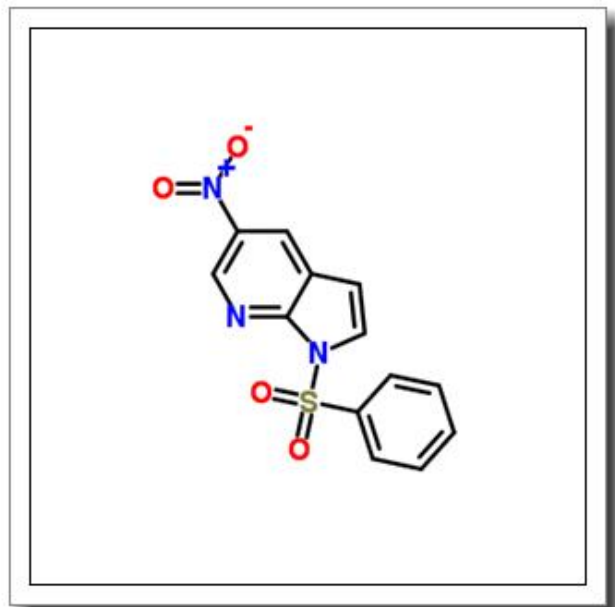


5-硝基-1-苯磺酰基-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶

tert-butyl 1-formylpiperidine-4-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl 1-formylpiperidine-4-carboxylate</i>
中文名称	5-硝基-1-苯磺酰基-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶
CAS 号	937012-11-8
分子式	C ₁₃ H ₉ N ₃ O ₄ S
分子量	303.293
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 5-硝基-1-苯磺酰基-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶 (5-Nitro-1-(phenylsulfonyl)-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine)，CAS 号 937012-11-8，分子式 C₁₃H₉N₃O₄S，分子量 303.293。其结构包含硝基、苯磺酰基和吡咯并吡啶骨架，赋予其独特的化学稳定性和反应活性。纯度 ≥96%，可通过 HPLC 和 NMR 验证。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为杂环芳烃衍生物，具有显著的生物活性。硝基和磺酰基的引入增强了其电子亲和性，使其成为医药中间体和酶抑制剂研究中的关键模块。其吡咯并吡啶核心结构可模拟天然嘌呤碱基，在核苷类似物开发中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于药物研发领域，特别是抗肿瘤和抗病毒先导化合物的合成。具体用途包括：

- 作为激酶抑制剂的核心骨架
- 用于构建 DNA 嵌入剂或拓扑异构酶抑制剂
- 在荧光探针开发中作为信号基团载体
- 有机合成中作为多官能团化砌块

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C、避光、干燥条件下密封保存，有效期 24 个月。使用时需在惰性气体（如氮气）保护下操作，避免与强氧化剂接触。溶解性测试表明易溶于 DMSO、DMF 等极性有机溶剂，水溶性较差 (<0.1 mg/mL)。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 ≥96%，重金属含量 <10 ppm。安全数据：

- 危险代码：Xi（刺激性）
- 个人防护需佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套

- 废弃物处理应遵循有机有害物处置规范
- 急性毒性数据（大鼠口服 LD50）： >2000 mg/kg

注：本产品仅供科研用途，不适用于临床或食品领域。使用前请查阅最新版 MSDS 并执行风险评估。