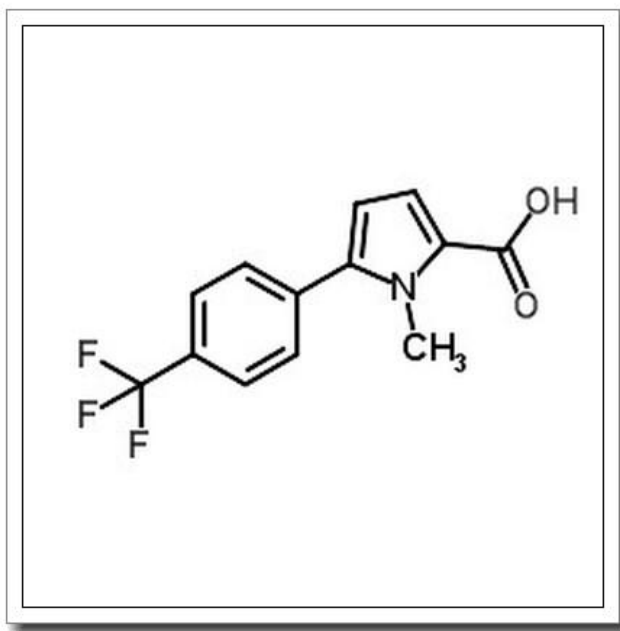


1-甲基-5-[4-(三氟甲基)苯基]-1H-吡咯-2-羧酸

1-Methyl-5-[4-(trifluoromethyl)phenyl]-1H-pyrrole-2-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-Methyl-5-[4-(trifluoromethyl)phenyl]-1H-pyrrole-2-carboxylic acid
中文名称	1-甲基-5-[4-(三氟甲基)苯基]-1H-吡咯-2-羧酸
CAS 号	1153905-13-5
分子式	C ₁₃ H ₁₀ F ₃ N ₂ O ₂
分子量	269.219
纯度	>96%

产品说明

1-甲基-5-[4-(三氟甲基)苯基]-1H-吡咯-2-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 1-甲基-5-[4-(三氟甲基)苯基]-1H-吡咯-2-羧酸，CAS 号为 1153905-13-5，分子式 C₁₃H₁₀F₃N₂O₂，分子量 269.219。其结构中含吡咯环与三氟甲基苯基官能团，赋予其独特的极性和疏水性平衡。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，熔点为 180-185° C（分解），易溶于 DMSO、甲醇等有机溶剂，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为吡咯羧酸衍生物，可通过羧基与靶标蛋白形成氢键或金属配位作用，三氟甲基苯基则增强其细胞膜穿透性。在药物研发中，其结构特征被用于设计酶抑制剂或受体调节剂，尤其在抗炎、抗肿瘤靶点研究中显示潜在活性。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药中间体合成及生物活性分子开发。具体用途包括：

- 1) 作为小分子探针用于激酶或 G 蛋白偶联受体的结构-活性关系研究；
- 2) 构建含三氟甲基的杂环化合物库，用于高通量筛选；
- 3) 在农用化学品领域作为先导化合物优化模板。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20° C、避光、干燥的惰性气体环境中，有效期 24 个月。使用前需恢复至室温并短暂离心。建议工作浓度通过预实验确定（常用范围 1-100 μM），溶解时优先选用 DMSO 配制母液（10 mM），后续用缓冲液稀释至目标浓度。

5. 质量控制与安全信息

批次质检报告包含 HPLC 纯度、NMR 及质谱结构确证数据。本品对眼睛和皮肤有轻微刺激性，操作时需佩戴防护手套及护目镜，在通风橱中进行。若接触皮肤，立即用大量清水冲洗。废弃物处置需符合危险化学品管理规范。

(注: 本说明基于现有研究数据, 实际应用前请查阅最新文献并开展实验验证。)