(2Z)-3-(6-Fluoro-1H-indol-3-yl)acrylonitrile

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	(2Z)-3-(6-Fluoro-1H-indol-3-yl)acrylonitrile
产品目录号	
CAS 号	1350543-67-7
分子式	C11H7FN2
分子量	186.185
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(2Z)-3-(6-Fluoro-1H-indol-3-yl)acrylonitrile 是一种含氟吲哚类衍生物，化学式为 C11H7FN2，分子量 186.185，CAS 号为 1350543-67-7。该化合物以白色至淡黄色结晶或粉末形式存在，纯度超过 96%。其结构特征为吲哚环 3 位上的丙烯腈基团（-CH=CH-CN）与 6 位氟原子的协同作用，赋予其独特的电子效应和空间位阻。Z 型构型（2Z）表明双键采取顺式排列，这一特性可能影响其与生物靶标的相互作用。

2. 生物化学功能与重要性

作为吲哚类生物碱的结构类似物，该化合物可通过竞争性抑制或共价修饰参与多种酶促反应。氟原子的引入增强了其脂溶性和代谢稳定性，而丙烯腈基团可作为迈克尔受体与巯基发生亲核加成，使其在激酶抑制剂或凋亡诱导剂开发中具有潜在价值。其分子设计可能针对 ATP 结合口袋或变构调节位点，适用于信号通路干预研究。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于药物研发领域，特别适用于以下场景：

- 作为先导化合物用于抗肿瘤或抗炎药物的结构优化
- 用于构建荧光探针前体，研究吲哚相关代谢通路
- 在有机合成中作为关键中间体，制备含氟杂环化合物
- 体外实验中用于评估氟取代对生物活性的影响规律

4. 储存条件与使用建议

建议在-20℃、避光、干燥条件下长期储存，短期使用可置于 4℃环境。开封后需充入惰性气体（如氮气）保护，避免反复冻融。使用时应在通风橱中操作，溶解推荐使用 DMSO 或乙醇（浓度≤10 mM），工作液建议现配现用。与还原性物质或强碱接触可能导致降解。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 归一化法检测纯度＞96%，批次间差异＜2%。MS 和 1H NMR 验证结构一致性。安全数据表明其具有刺激性，操作需佩戴防护手套及护目镜。急性毒性 LD50（大鼠口服）＞500 mg/kg，不慎接触眼睛应立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物处置需符合危险化学品管理规范。

（注：实际文档中需补充具体厂商信息、COA 链接及应急联系电话）