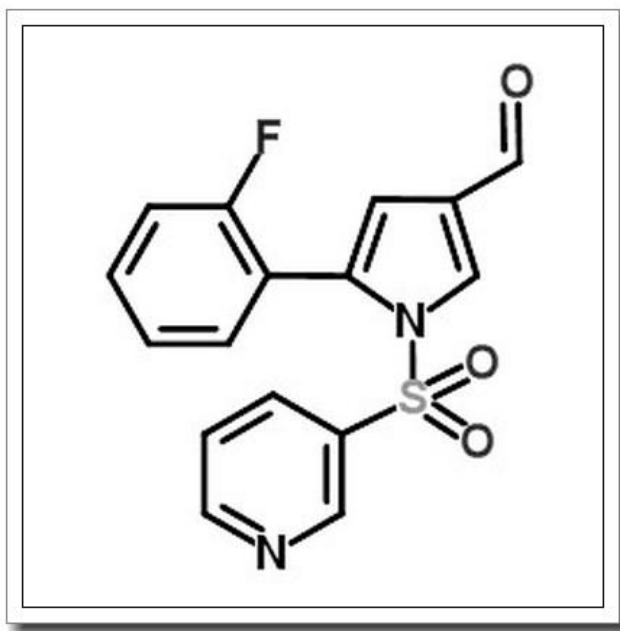


5-(2-氟苯基)-1-[(吡啶-3-基)磺酰基]- 1H-吡咯-3-甲醛

1H-Pyrrole-3-carboxaldehyde, 5-(2-fluorophenyl)-1-(3-pyridinylsulfonyl)



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|---|
| 化学名称 | 1H-Pyrrole-3-carboxaldehyde, 5-(2-fluorophenyl)-1-(3-pyridinylsulfonyl) |
| 中文名称 | 5-(2-氟苯基)-1-[(吡啶-3-基)磺酰基]-1H-吡咯-3-甲醛 |
| CAS 号 | 881677-11-8 |
| 分子式 | C ₁₆ H ₁₁ FN ₂ O ₃ S |
| 分子量 | 330.333 |
| 纯度 | >96% |

产品说明

1. 产品概述与化学特性

5-(2-氟苯基)-1-[(吡啶-3-基)磺酰基]-1H-吡咯-3-甲醛 (CAS 号: 881677-11-8) 是一种含氟吡咯衍生物, 分子式为 $C_{16}H_{11}FN_2O_3S$, 分子量为 330.333。该化合物以白色至浅黄色固体形式存在, 纯度高于 96%。其结构中的吡咯环、氟苯基和吡啶磺酰基团赋予其独特的化学性质, 使其在有机合成和药物化学中具有重要价值。该化合物在常温下稳定, 但需避免强酸、强碱及氧化剂环境。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为吡咯类衍生物, 可通过其醛基和磺酰基参与多种亲核反应和偶联反应, 是构建复杂杂环分子的关键中间体。其氟苯基结构可能增强化合物的脂溶性和生物膜穿透能力, 因此在药物研发中常用于靶向酶或受体的修饰与优化。此外, 吡啶磺酰基的存在可能影响其与蛋白质的相互作用, 使其在生物活性分子筛选中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发和有机合成领域。在药物化学中, 它可作为先导化合物用于设计抗肿瘤、抗炎或中枢神经系统药物。在有机合成中, 其醛基可用于缩合反应制备席夫碱或杂环化合物, 而磺酰基可作为保护基或参与过渡金属催化反应。此外, 它还可作为荧光探针或生物标记物的合成前体。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光保存, 长期储存需充惰性气体保护。使用时需在干燥环境中操作, 避免接触水分。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和丙酮, 微溶于甲醇, 不溶于水。实验过程中建议佩戴防护手套和护目镜, 并在通风橱中操作。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确认纯度 $>96\%$, 并提供质谱和核磁共振谱图验证结构。安全信息显示, 该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时应避免直接接触。如不慎

接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照危险化学品处理规范处置。建议在专业人员指导下使用，并严格遵守实验室安全规程。