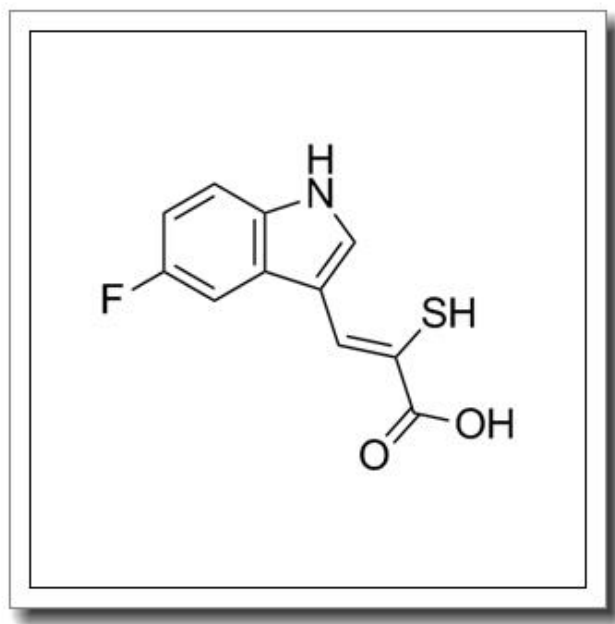


3-(5-氟-1H-吲哚-3-基)-2-巯基-2-丙烯酸

2- Propenoic acid, 3- (5- fluoro- 1H- indol- 3- yl) - 2- mercapto-



产品基本信息

属性	值
化学名称	2- Propenoic acid, 3- (5- fluoro- 1H- indol- 3- yl) - 2- mercapto-
中文名称	3-(5-氟-1H-吲哚-3-基)-2-巯基-2-丙烯酸
CAS 号	179461-52-0
分子式	C11H8FN02S
分子量	237.25
纯度	≥96%

产品说明

2-丙烯酸-3-(5-氟-1H-吡啶-3-基)-2-巯基-产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至淡黄色结晶性粉末，化学名称为 3-(5-氟-1H-吡啶-3-基)-2-巯基-2-丙烯酸，CAS 号 179461-52-0，分子式 $C_{11}H_8FN_2S$ ，分子量 237.25。其结构中包含吡啶环、巯基和丙烯酸基团，具有显著的电子共轭效应和反应活性。纯度 $\geq 96\%$ (HPLC 测定)，易溶于二甲基亚砷 (DMSO) 和部分有机溶剂，水溶性较低。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为吡啶衍生物，可通过巯基与蛋白质的巯基或二硫键发生特异性结合，同时丙烯酸基团可作为迈克尔加成受体参与共价修饰。5-氟取代增强了其代谢稳定性，使其在靶向药物设计中具有特殊价值。研究表明，此类结构可调控激酶活性，并可能影响细胞信号转导通路。

3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药研发：用于设计小分子抑制剂，靶向癌症、炎症相关蛋白（如 EGFR、JAK 家族激酶）
- 3.2 化学生物学：作为探针分子研究蛋白质-配体相互作用机制
- 3.3 材料科学：合成功能性高分子材料的中间体
- 3.4 农业化学：新型农药活性成分的前体化合物

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存：密封避光保存于 -20°C 干燥环境中，惰性气体保护可延长稳定性
- 4.2 溶解：建议先用 DMSO 配制成 10-50mM 母液，再用缓冲液稀释
- 4.3 操作：需在通风橱中佩戴防尘口罩及丁腈手套，避免吸入或皮肤接触
- 4.4 稳定性：溶液状态在 4°C 下可保存 72 小时，避免反复冻融

5. 质量控制与安全信息

- 5.1 质检标准：通过 HPLC、NMR 和质谱进行批次验证，水分含量 $< 0.5\%$
- 5.2 安全数据：急性毒性 (LD50 大鼠口服) $> 500\text{mg/kg}$ ，皮肤刺激性类别 3

5.3 废弃物处理：按危险化学品处置，不可直接排入下水道

5.4 应急措施：接触眼睛后立即用生理盐水冲洗 15 分钟，皮肤接触时用肥皂水彻底清洗

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物质安全数据表（MSDS）并进行风险评估。