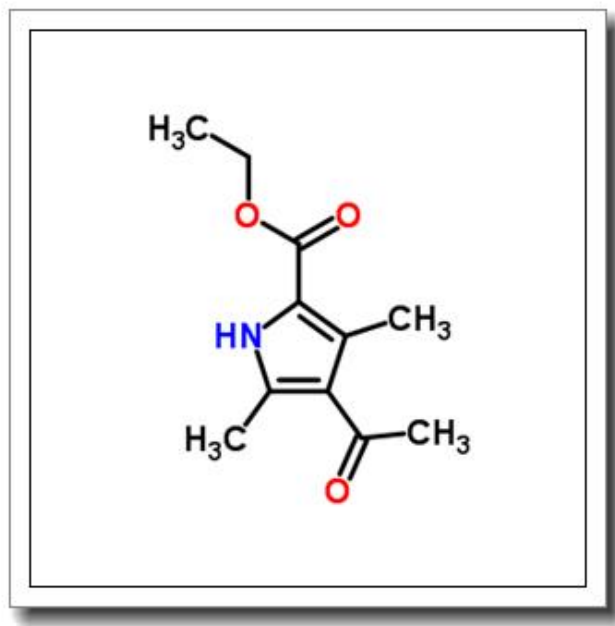


3-乙酰基-2,4-二甲基-5-乙氧羰基吡咯

ethyl 4-acetyl-3,5-dimethyl-1H-pyrrole-2-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 4-acetyl-3,5-dimethyl-1H-pyrrole-2-carboxylate
中文名称	3-乙酰基-2,4-二甲基-5-乙氧羰基吡咯
CAS 号	2386-26-7
分子式	C ₁₁ H ₁₅ N ₃ O ₃
分子量	209.242
纯度	≥96%

产品说明

3-乙酰基-2,4-二甲基-5-乙氧羰基吡咯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 ethyl 4-acetyl-3,5-dimethyl-1H-pyrrole-2-carboxylate, 中文系统命名为 3-乙酰基-2,4-二甲基-5-乙氧羰基吡咯, CAS 号为 2386-26-7。其分子式为 C₁₁H₁₅N₃O₃, 分子量 209.242, 是一种淡黄色至白色结晶粉末, 纯度 ≥96%。该化合物属于吡咯衍生物, 结构中同时包含乙酰基和乙氧羰基官能团, 使其兼具亲脂性和反应活性, 易溶于有机溶剂如乙醇、二甲基亚砜 (DMSO), 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡咯环的修饰衍生物, 该化合物在生物化学领域具有重要价值。其结构中的乙酰基可作为电子受体参与酶促反应, 而乙氧羰基则增强了分子的稳定性。这类结构单元广泛存在于天然产物 (如卟啉类化合物) 和药物分子中, 可用于模拟生物体内血红素或维生素 B12 的核心结构, 在酶抑制剂设计和信号通路研究中发挥关键作用。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于医药研发和有机合成领域。在医药方面, 可作为合成抗菌剂、抗炎药的中间体; 在材料科学中, 用于构建光电功能材料的吡咯骨架。具体用途包括: 1) 卟啉类大环化合物的前体合成; 2) 金属配位化学中的辅助配体; 3) 荧光探针分子的修饰基团。实验显示其在 Pd 催化偶联反应中表现优异。

4. 储存条件与使用建议

建议储存于-20℃至 4℃的干燥环境中, 避光密封保存。开封后需充入惰性气体 (如氮气) 保护, 防止氧化降解。使用前需恢复至室温并充分干燥, 称量时避免接触金属器具。推荐工作浓度为 1-10 mM (DMSO 配制), 现配现用。残留溶液应于-20℃保存不超过 72 小时。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，批次间差异 $< 2\%$ 。MS 和 NMR 谱图数据可随货提供。安全警示：该物质可能引起眼睛和皮肤刺激，操作时需佩戴护目镜和丁腈手套，在通风橱中进行。若接触皮肤，立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物应作为有害化学品处置，遵守当地环保法规。

（注：本说明基于现有研究数据编制，实际应用前请查阅最新文献并开展小试实验。）