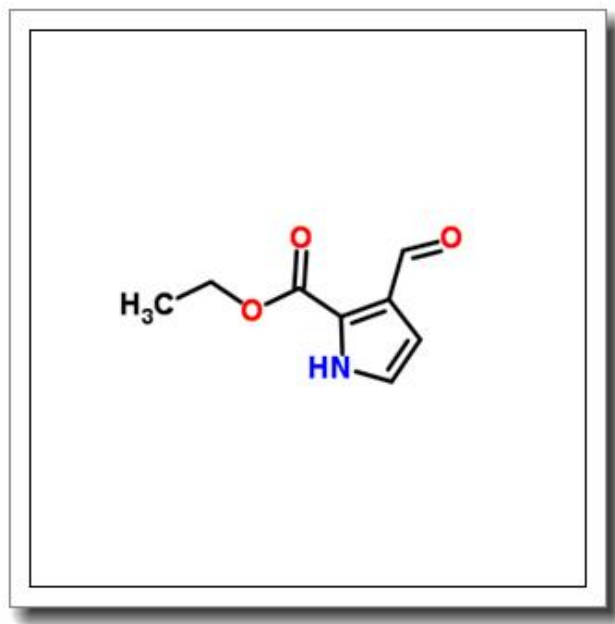


3-甲酰基-1H-吡咯-2-羧酸乙酯

Ethyl 3-formyl-1H-pyrrole-2-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 3-formyl-1H-pyrrole-2-carboxylate
中文名称	3-甲酰基-1H-吡咯-2-羧酸乙酯
CAS 号	36131-43-8
分子式	C ₈ H ₉ N ₃
分子量	167.162
纯度	≥96%

产品说明

3-甲酰基-1H-吡咯-2-羧酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-甲酰基-1H-吡咯-2-羧酸乙酯 (Ethyl 3-formyl-1H-pyrrole-2-carboxylate) 是一种重要的吡咯类衍生物，化学式为 $C_8H_9NO_3$ ，分子量为 167.162，CAS 号为 36131-43-8。本品为白色至淡黄色结晶或粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，具有特征性吡咯环结构和活性醛基官能团，易溶于有机溶剂如乙醇、二甲基亚砜 (DMSO)，微溶于水。其化学性质活泼，可参与缩合、加成等多种有机反应，是合成复杂杂环化合物的关键中间体。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学领域具有显著价值。其吡咯骨架是天然产物（如血红素、维生素 B12）的核心结构单元，而甲酰基的引入增强了其作为前体分子的反应多样性。在酶抑制研究和药物设计中，3-甲酰基-1H-吡咯-2-羧酸乙酯可通过与蛋白质氨基酸的特异性结合，用于开发靶向治疗剂或生物探针。此外，其在卟啉类化合物合成中的桥梁作用不可替代。

3. 主要应用领域与具体用途

医药研发领域：作为抗肿瘤、抗菌药物的中间体，用于构建吡咯并嘧啶等药效团。

材料科学：参与合成光电功能材料，如有机发光二极管 (OLED) 的配体前驱体。

农业化学：衍生为新型杀虫剂或植物生长调节剂的活性成分。

学术研究：在金属配合物催化、荧光标记等领域作为基础试剂。

4. 储存条件与使用建议

储存条件：需密封保存于干燥、阴凉处（建议 $2-8^{\circ}C$ ），避免光照和潮湿环境。长期储存建议充氮保护。

使用建议：操作时佩戴防护手套和护目镜，在通风橱中进行称量与反应。因醛基易氧化，开封后建议尽快使用，剩余试剂需重新密封并标注日期。溶解时优先选用无水级溶剂以减少副反应。

5. 质量控制与安全信息

质量控制：通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，水分含量 $\leq 0.5\%$ ，残留溶剂符合 USP 标准。每批次提供 COA（分析证书）及核磁图谱（ $^1\text{H NMR}$ ）。

安全信息：本品对眼睛和皮肤有刺激性（GHS 分类：H315-H319），不慎接触需用大量清水冲洗。非易燃但受热分解可能释放有毒气体（ NO_x ）。废弃处理应遵循当地化学品管理条例。

（注：本说明基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件验证。产品规格可能因批次调整，请以随货质检报告为准。）