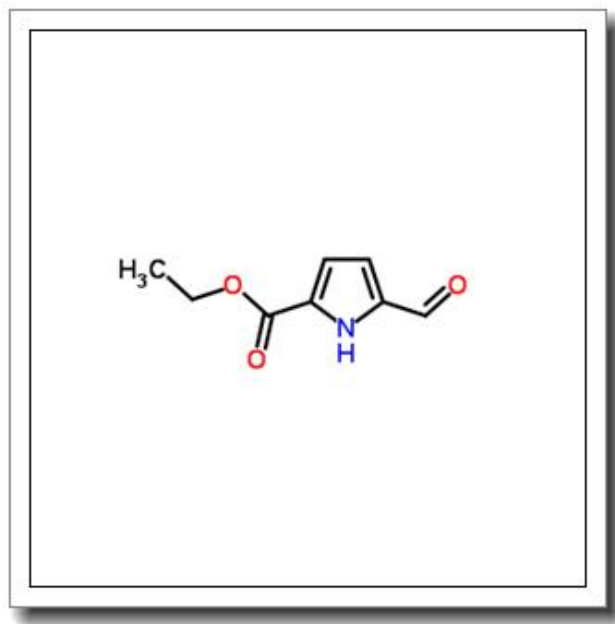


5-甲酰基-1H-吡咯-2-甲酸乙酯

Ethyl 5-formyl-1H-pyrrole-2-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 5-formyl-1H-pyrrole-2-carboxylate
中文名称	5-甲酰基-1H-吡咯-2-甲酸乙酯
CAS 号	7126-50-3
分子式	C ₈ H ₉ N ₃ O ₃
分子量	167.162
纯度	≥96%

产品说明

5-甲酰基-1H-吡咯-2-甲酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-甲酰基-1H-吡咯-2-甲酸乙酯 (Ethyl 5-formyl-1H-pyrrole-2-carboxylate, CAS 号 7126-50-3) 是一种重要的吡咯衍生物, 分子式为 $C_8H_9NO_3$, 分子量 167.162。该化合物为白色至淡黄色结晶或粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 兼具甲酰基和酯基官能团, 具有良好的化学反应活性。其结构中的吡咯环是多种生物活性分子的核心骨架, 赋予其在有机合成和药物化学中的独特价值。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡咯类化合物的关键中间体, 5-甲酰基-1H-吡咯-2-甲酸乙酯在生物碱、卟啉类化合物及天然产物的合成中具有重要作用。其甲酰基可参与缩合、还原等反应, 酯基则易于水解或转化, 为构建复杂杂环体系提供高效模块。该分子在药物研发中常用于抗菌、抗肿瘤先导化合物的结构修饰。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于以下领域:

- 3.1 药物化学: 作为合成抗生素 (如吡咯霉素类似物) 和抗炎药物的中间体。
- 3.2 材料科学: 用于制备光电功能材料的前驱体, 如有机半导体或荧光染料。
- 3.3 学术研究: 在金属卟啉配合物合成中作为配体原料, 或用于酶抑制剂的设计。

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存条件: 需避光密封保存于 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 干燥环境中, 长期存放建议充氮保护。
- 4.2 使用建议: 开封后需尽快使用, 避免反复冻融; 反应操作应在惰性气体保护下进行, 以防甲酰基氧化。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、氯仿等有机溶剂。

5. 质量控制与安全信息

- 5.1 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 ICH 标

准。

5.2 安全信息：本品对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应佩戴防护手套及护目镜。若接触皮肤，立即用大量清水冲洗。废弃物需按危险化学品规范处置。MSDS 资料备索。

注：本产品仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。具体应用需根据实验需求进一步优化条件。