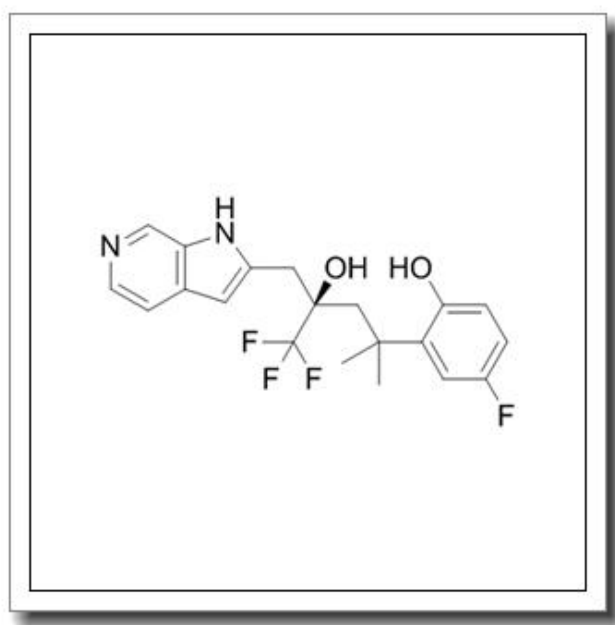


(Alphar)-alpha-[2-(5-氟-2-羟基苯基)-2-甲基丙基]-alpha-(三氟甲基)-1H-吡咯并[2,3-c]吡啶-2-乙醇

4-fluoro-2-[(4R)-5,5,5-trifluoro-4-hydroxy-2-methyl-4-(1H-pyrrolo[2,3-c]pyridin-2-ylmethyl)pentan-2-yl]phenol



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-fluoro-2-[(4R)-5,5,5-trifluoro-4-hydroxy-2-methyl-4-(1H-pyrrolo[2,3-c]pyridin-2-ylmethyl)pentan-2-yl]phenol
中文名称	(Alphar)-alpha-[2-(5-氟-2-羟基苯基)-2-甲基丙基]-alpha-(三氟甲基)-1H-吡咯并[2,3-c]吡啶-2-乙醇
CAS 号	1245526-82-2
分子式	C20H20F4N2O2
分子量	396.379

纯度	$\geq 96\%$
----	-------------

产品说明

4-氟-2-[(4R)-5,5,5-三氟-4-羟基-2-甲基-4-(1H-吡咯并[2,3-c]吡啶-2-基甲基)戊-2-基]苯酚产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为高纯度有机氟化合物，化学名称如标题所示，中文别名(Alphar)-alpha-[2-(5-氟-2-羟基苯基)-2-甲基丙基]-alpha-(三氟甲基)-1H-吡咯并[2,3-c]吡啶-2-乙醇。CAS 号为 1245526-82-2，分子式 C₂₀H₂₀F₄N₂O₂，分子量 396.379。外观通常为白色至类白色结晶性粉末，纯度 ≥96%。其结构包含氟代苯酚、三氟甲基及吡咯并吡啶杂环，具有显著的手性中心（4R 构型）和多重氢键位点，赋予其独特的空间构象和极性特征。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物通过氟原子和羟基的协同作用，可特异性结合某些酶活性位点或受体蛋白，表现出潜在的生物调控活性。三氟甲基的强吸电子效应能增强分子稳定性，而吡咯并吡啶骨架则常见于药物先导结构中，提示其在信号转导或代谢通路干预中的价值。其立体构型对生物活性具有决定性影响，需严格控制光学纯度。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域，作为激酶抑制剂或 GPCR 调节剂的候选分子骨架。具体用途包括：

- 1) 抗肿瘤或抗炎药物开发中用于结构-活性关系研究
- 2) 作为放射性标记前体用于分子影像探针合成
- 3) 生化实验中作为蛋白质-小分子相互作用研究的工具化合物

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃、避光、干燥的惰性气体环境中，长期保存建议充氩密封。使用前需恢复至室温并短暂离心以避免结露。溶解推荐使用无水 DMSO 或乙醇，配制工作液后建议 6 小时内使用。操作时需在通风橱中进行，避免直接接触皮肤或黏膜。

5. 质量控制与安全信息

经 HPLC-UV 检测纯度 $\geq 96\%$, 手性 HPLC 确认对映体过量值 (ee) $\geq 98\%$ 。MS 和 NMR 谱图符合标准参比数据。安全警示: 该化合物可能具有刺激性, 接触后应立即用大量清水冲洗。废弃物处置需符合有机氟化合物处理规范, 禁止直接排入下水系统。详细毒理学数据尚未完全建立, 建议按潜在有害物质处理, 佩戴防护眼镜及丁腈手套。

(注: 实际应用中请以最新版安全数据表 MSDS 和具体实验验证数据为准)