

1-(2,2-difluoro-1,3-benzodioxol-5-yl)-N-[1-[(2R)-2,3-dihydroxypropyl]-6-fluoro-2-(1-hydroxy-2-methylpropan-2-yl)indol-5-yl]cyclopropane-1-carboxamide

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	1-(2,2-difluoro-1,3-benzodioxol-5-yl)-N-[1-[(2R)-2,3-dihydroxypropyl]-6-fluoro-2-(1-hydroxy-2-methylpropan-2-yl)indol-5-yl]cyclopropane-1-carboxamide
产品目录号	
CAS 号	1152311-62-0
分子式	C ₂₆ H ₂₇ F ₃ N ₂ O ₆
分子量	520.498
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为高纯度有机氟化合物，化学名称为 1-(2,2-二氟-1,3-苯并二氧戊环-5-基)-N-[1-[(2R)-2,3-二羟基丙基]-6-氟-2-(1-羟基-2-甲基丙-2-基)吡啶-5-基]环丙烷-1-甲酰胺，CAS 号为 1152311-62-0。分子式为 C₂₆H₂₇F₃N₂O₆，分子量 520.498，纯度经 HPLC 验证大于 96%。该化合物结构包含苯并二氧戊环、吡啶环及环丙烷甲酰胺等特征基团，具有显著的空间位阻效应和手性中心，需避光保存于-20℃干燥环境中。

2. 生物化学功能与重要性

作为小分子抑制剂，本品可通过特异性结合靶蛋白激酶结构域，干扰 ATP 结合位点，从而调控下游信号通路。其苯并二氧戊环和氟代吡啶结构赋予其优异的膜穿透性和代谢稳定性，而环丙烷甲酰胺片段则增强了对靶标的选择性。该特性使其在细胞凋亡、增殖抑制等研究中具有关键作用，尤其适用于肿瘤学与免疫学领域的基础机制探索。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于以下场景：

- (1) 体外激酶活性抑制实验，浓度范围通常为 0.1-10 μ M；
- (2) 肿瘤细胞株（如乳腺癌 MCF-7、肺癌 A549）的增殖抑制研究；
- (3) 动物模型中的药效学评估，需配合 DMSO/PEG400 溶剂体系使用；
- (4) 作为先导化合物用于结构-活性关系（SAR）优化研究。

4. 储存条件与使用建议

长期储存建议置于-20℃真空密封环境，避免反复冻融（解冻后需分装使用）。工作液需现配现用，溶剂推荐使用预冷的无水 DMSO（浓度不超过 10 mM），后续稀释建议采用含 0.1% BSA 的 PBS 缓冲液。操作时需佩戴防渗透手套，并在通风橱中进行称量。

5. 质量控制与安全信息

本品经质谱 (MS) 和核磁共振 (NMR) 验证结构, HPLC 检测单一主峰面积占比 $\geq 96\%$ 。急性毒性数据 (大鼠口服 LD50) 为 320 mg/kg, 属于有害物质 (GHS 分类: H302)。如接触皮肤, 需立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物处理应遵循当地危险化学品处置法规, 禁止直接排入下水系统。

(注: 具体实验条件需根据实际研究体系优化, 建议参考文献中 EC50 数据设计浓度梯度。)