

2-((1H-pyrrolo[2,3-b]pyridin-5-yl)oxy)-4-(4-((4'-chloro-5,5-dimethyl-3,4,5,6-tetrahydro-[1,1'-biphenyl]-2-yl)methyl)piperazin-1-yl)benzoic acid

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	2-((1H-pyrrolo[2,3-b]pyridin-5-yl)oxy)-4-(4-((4'-chloro-5,5-dimethyl-3,4,5,6-tetrahydro-[1,1'-biphenyl]-2-yl)methyl)piperazin-1-yl)benzoic acid
产品目录号	
CAS 号	1235865-77-6
分子式	C33H35C1N4O3
分子量	571.109
纯度	>96%

产品说明

2-((1H-吡咯并[2,3-b]吡啶-5-基)氧基)-4-(4-((4'-氯-5,5-二甲基-3,4,5,6-四氢-[1,1'-联苯]-2-基)甲基)哌嗪-1-基)苯甲酸是一种高纯度有机化合物, CAS 号为 1235865-77-6, 分子式为 C₃₃H₃₅C₁N₄O₃, 分子量为 571.109。该化合物属于苯甲酸衍生物, 结构中包含吡咯并吡啶环、哌嗪基团和联苯基团, 具有显著的疏水性和刚性特征。其纯度超过 96%, 常温下呈白色至类白色结晶粉末, 可溶于 DMSO、DMF 等有机溶剂, 微溶于甲醇和乙醇, 几乎不溶于水。

该化合物的生物化学功能主要体现在其作为激酶抑制剂的潜力。分子结构中的吡咯并吡啶片段可模拟 ATP 结合位点, 而哌嗪基团则增强了与靶蛋白的相互作用能力。研究表明, 这类结构类似物在细胞信号转导调控中具有重要作用, 特别是对特定酪氨酸激酶的抑制作用可能影响细胞增殖和凋亡途径。

在应用领域方面, 该产品主要作为医药研发中间体使用。具体用途包括: 1) 用于激酶抑制剂类抗肿瘤药物的结构优化研究; 2) 作为分子探针用于激酶功能机制研究; 3) 在药物筛选中作为阳性对照化合物。其独特的联苯-哌嗪结构使其成为设计蛋白-蛋白相互作用抑制剂的重要模板。

储存条件要求严格, 建议在-20℃下避光保存, 置于干燥惰性气体环境中。开封后应充氮密封, 避免反复冻融。使用前需室温平衡至少 30 分钟, 配制溶液时应使用新鲜无水溶剂, 并建议现配现用。长期储存需定期检测纯度变化。

质量控制采用 HPLC 归一化法确保纯度 >96%, 同时通过质谱和核磁共振进行结构确证。安全信息显示该化合物属于刺激性化学品, 操作时应佩戴防护手套和护目镜, 在通风橱中进行。如接触皮肤, 需立即用大量清水冲洗。废弃物处理需符合危险化学品处置规范, 不可直接排入下水道。详细安全数据请参阅配套提供的 MSDS 文件。