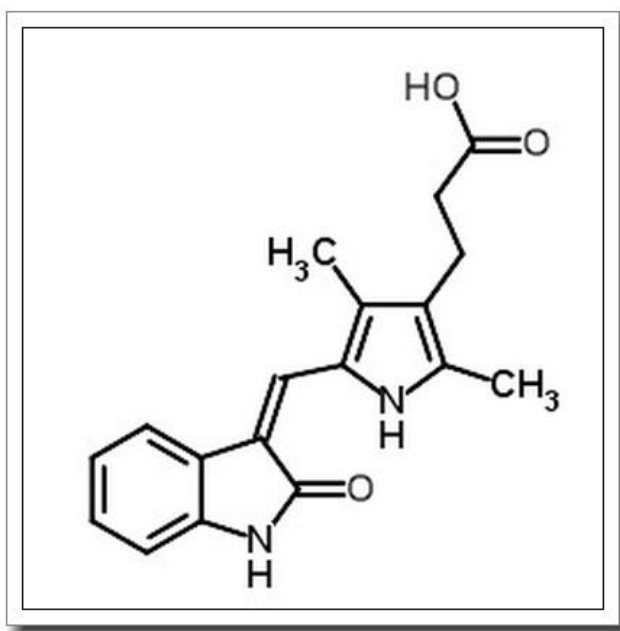


抗癌医药中间体

3-[2,4-dimethyl-5-(2-oxo-1,2-dihydroindol-3-ylidenemethyl)-1H-pyrrol-3-yl]propionic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-[2,4-dimethyl-5-(2-oxo-1,2-dihydroindol-3-ylidenemethyl)-1H-pyrrol-3-yl]propionic acid
中文名称	抗癌医药中间体
CAS 号	210644-62-5
分子式	C ₁₈ H ₁₈ N ₂ O ₃
分子量	310.347
纯度	>96%

产品说明

3-[2,4-二甲基-5-(2-氧代-1,2-二氢吡咯-3-亚甲基)-1H-吡咯-3-基]丙酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品是一种具有明确结构的吡咯类衍生物，化学名称为 3-[2,4-二甲基-5-(2-氧代-1,2-二氢吡咯-3-亚甲基)-1H-吡咯-3-基]丙酸，CAS 号为 210644-62-5，分子式 C₁₈H₁₈N₂O₃，分子量 310.347。该化合物以淡黄色至橙色结晶粉末形式存在，纯度经 HPLC 验证大于 96%，符合医药中间体的质量标准。其结构中的吡咯环与吡咯环共轭体系赋予其独特的光化学特性，需避光保存。

2. 生物化学功能与重要性

作为小分子靶向药物关键中间体，该化合物可通过抑制特定激酶活性干扰肿瘤细胞增殖信号通路。其分子设计保留了与 ATP 结合位点竞争性结合的能力，在抗血管生成和诱导凋亡研究中表现出潜在活性，是开发多靶点抗癌药物的优选骨架结构。

3. 主要应用领域与具体用途

目前主要应用于以下领域：

- 新型酪氨酸激酶抑制剂（TKI）的合成前体
- 实体瘤治疗药物的结构优化研究
- 临床前药效学评估的参比化合物

实验室使用时建议溶解于 DMSO 配制母液（浓度 ≤ 10mM），后续用缓冲液稀释至工作浓度。

4. 储存条件与使用建议

长期储存需置于 -20℃、充氮气密封的避光环境中，开封后建议分装使用以避免反复冻融。工作溶液在 4℃ 条件下稳定期不超过 72 小时。操作时需在通风橱中进行，佩戴防尘口罩及丁腈手套。

5. 质量控制与安全信息

批次质检报告包含 HPLC 纯度检测、水分含量（KF 法）及重金属残留数据。根据

GHS 分类，该产品属于急性毒性类别 4（口服），处理时应避免吸入粉尘或接触皮肤。废弃物处置需符合危险化学品管理规定，建议采用专业焚烧处理。

注：本产品仅限科研用途，不可直接用于人体或临床治疗。具体实验方案需根据目标蛋白结合位点特征进行结构修饰优化。