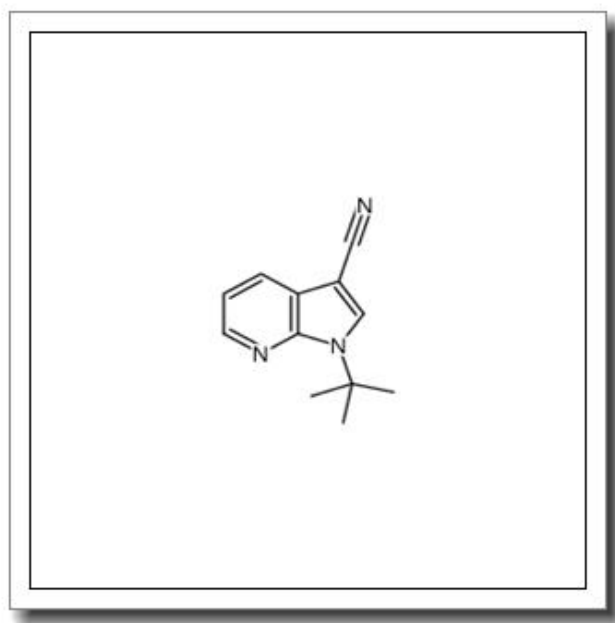


1-(2-Methyl-2-propanyl)-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine-3-carbonitrile

1-(2-Methyl-2-propanyl)-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine-3-carbonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-(2-Methyl-2-propanyl)-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine-3-carbonitrile
中文名称	1-(2-Methyl-2-propanyl)-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine-3-carbonitrile
CAS 号	269726-50-3
分子式	C ₁₂ H ₁₃ N ₃
分子量	199.252
纯度	≥96%

产品说明

1-(2-甲基-2-丙基)-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶-3-甲腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为高纯度有机化合物，化学名称为 1-(2-甲基-2-丙基)-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶-3-甲腈，英文名称 1-(2-Methyl-2-propanyl)-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine-3-carbonitrile, CAS 号 269726-50-3。其分子式为 C₁₂H₁₃N₃，分子量 199.252，外观通常为白色至类白色结晶或粉末。该化合物属于吡咯并吡啶衍生物，结构中含甲腈基团和叔丁基取代基，具有显著的疏水性和电子离域特性，纯度 ≥96% (HPLC 测定)。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为杂环芳烃衍生物，可通过 $\pi-\pi$ 堆积作用与生物大分子结合，其甲腈基团可作为氢键受体参与分子识别。在药物化学中，吡咯并吡啶骨架是多种激酶抑制剂的药效团核心，此类结构常表现出抗肿瘤、抗炎或神经调节活性。其叔丁基取代可增强空间位阻效应，提高代谢稳定性，是药物先导化合物优化的重要中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域，具体用途包括：1) 作为激酶抑制剂类抗癌药物（如 ALK、JAK 家族抑制剂）的关键合成砌块；2) 用于构建神经退行性疾病相关靶点（如 GSK-3 β ）的小分子探针；3) 在有机发光材料领域可作为电子传输层前体。实验室级产品适用于高通量筛选、结构-活性关系 (SAR) 研究及公斤级放大工艺开发。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭惰性容器中，置于 -20℃ 干燥避光环境，长期保存建议充氮保护。开封后需在干燥箱中平衡至室温再使用，避免吸湿。溶解性测试表明易溶于 DMSO (>50 mg/mL)、甲醇，微溶于水 (<0.1 mg/mL)。实验操作建议在通风橱中进行，配制溶液时优先选用非质子极性溶剂。

5. 质量控制与安全信息

批次质检报告包含 HPLC 纯度 ($\geq 96\%$)、LC-MS 结构验证及水分含量 (KF 法 $< 0.5\%$) 数据。根据 GHS 分类, 该产品可能造成眼睛刺激 (类别 2B), 操作时需佩戴护目镜和防尘口罩。废弃物应作为有害化学品处置, 避免与强氧化剂接触。详细毒理学数据可参考 SDS 第 11 节 (急性毒性: 大鼠经口 $LD_{50} > 2000 \text{ mg/kg}$)。

注: 本产品仅限科研用途, 不适用于诊断或治疗应用。使用者应具备有机化合物处理资质并遵守当地法规。