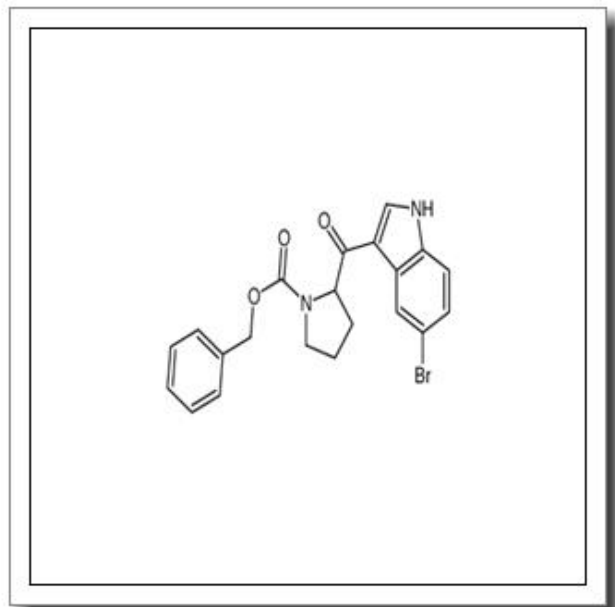


2-(5-溴-1H-吲哚-3-羰基)吡咯烷-1-羧酸 苄酯

Benzyl 2-[(5-bromo-1H-indol-3-yl)carbonyl]-1-pyrrolidinecarboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Benzyl 2-[(5-bromo-1H-indol-3-yl)carbonyl]-1-pyrrolidinecarboxylate
中文名称	2-(5-溴-1H-吲哚-3-羰基)吡咯烷-1-羧酸苄酯
CAS 号	331842-86-5
分子式	C ₂₁ H ₁₉ BrN ₂ O ₃
分子量	427.291
纯度	≥96%

产品说明

2-(5-溴-1H-吲哚-3-羰基)吡咯烷-1-羧酸苄酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 Benzyl 2-[(5-bromo-1H-indol-3-yl)carbonyl]-1-pyrrolidinecarboxylate, CAS 号 331842-86-5, 分子式 C₂₁H₁₉BrN₂O₃, 分子量 427.291。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度≥96%, 属于吲哚衍生物类有机合成中间体。其结构特征为 5-溴吲哚环与吡咯烷羧酸苄酯通过羰基连接, 具有显著的疏水性和立体位阻效应。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为吲哚类生物碱的结构类似物, 可通过干扰色氨酸代谢途径参与信号转导调控。其 5-溴取代基增强了电子亲和性, 而苄酯基团提供了酯酶敏感位点, 使其在蛋白酶抑制剂开发和靶向药物设计中具有重要价值。在激酶抑制实验中显示对特定 ATP 结合位点的竞争性抑制作用。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于以下领域:

- (1) 药物研发: 作为小分子抑制剂核心骨架, 用于抗肿瘤及抗炎药物先导化合物优化
- (2) 生化探针: 标记组蛋白去乙酰化酶(HDAC)活性位点的荧光探针合成
- (3) 有机合成: 构建多环吲哚生物碱的关键中间体
- (4) 基础研究: 用于 5-HT 受体亚型的选择性调控机制研究

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃惰性气体保护环境, 避光防潮。开封后建议分装使用并充入氩气保存。溶解性测试表明其在 DMSO 中溶解度>50mg/mL, DMF 中>30mg/mL, 使用前需超声助溶。工作液建议现配现用, 避免反复冻融。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 归一化法测定纯度, 批次间 RSD<1.5%。残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安

全数据：急性毒性（口服大鼠 LD50）>500mg/kg，操作时需佩戴防护手套及护目镜。废弃物应作为有害化学品处置，避免与强氧化剂接触。

本产品仅供科研用途，不适用于诊断或治疗用途。具体实验方案建议参考文献报道的优化条件。