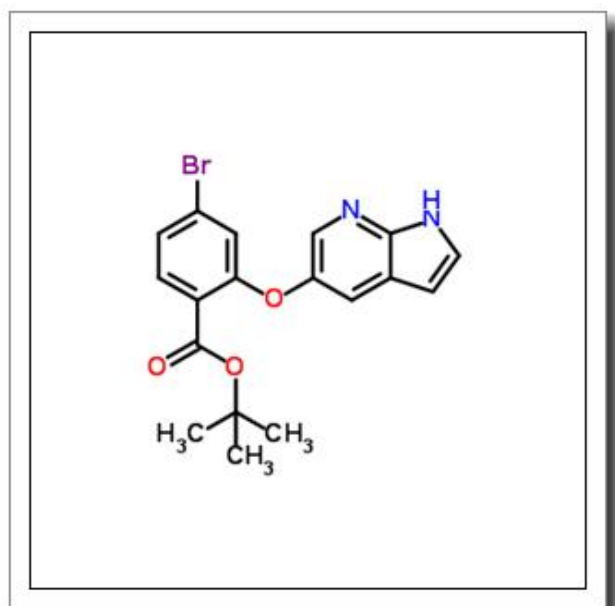


2-Methyl-2-propanyl 4-bromo-2-(1H-pyrrolo[2,3-b]pyridin-5-yloxy)benzoate

2-Methyl-2-propanyl 4-bromo-2-(1H-pyrrolo[2,3-b]pyridin-5-yloxy)benzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Methyl-2-propanyl 4-bromo-2-(1H-pyrrolo[2,3-b]pyridin-5-yloxy)benzoate
中文名称	2-Methyl-2-propanyl 4-bromo-2-(1H-pyrrolo[2,3-b]pyridin-5-yloxy)benzoate
CAS 号	1628047-84-6
分子式	C ₁₈ H ₁₇ BrN ₂ O ₃
分子量	389.243
纯度	≥ 96%

产品说明

2-甲基-2-丙基 4-溴-2-(1H-吡咯并[2,3-b]吡啶-5-基氧基)苯甲酸酯产品说明书

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 2-甲基-2-丙基 4-溴-2-(1H-吡咯并[2,3-b]吡啶-5-基氧基)苯甲酸酯，CAS 号为 1628047-84-6，分子式 $C_{18}H_{17}BrN_2O_3$ ，分子量 389.243。该化合物为白色至类白色结晶性粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，可溶于常见有机溶剂如 DMSO、甲醇和乙腈，微溶于水。其结构包含苯甲酸酯骨架、溴代芳环及吡咯并吡啶杂环，具有显著的分子刚性和空间位阻效应。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是一种重要的医药中间体，其吡咯并吡啶结构是多种激酶抑制剂的活性核心。溴代芳环与酯基的协同作用使其可作为靶向药物修饰的关键位点，尤其在蛋白激酶调节剂和抗肿瘤先导化合物的合成中具有不可替代性。其分子设计兼顾了亲脂性与氢键结合能力，在药物化学中常用于优化化合物的细胞膜穿透性和靶标结合活性。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于创新药物研发领域，具体用途包括：1) 作为小分子激酶抑制剂的合成砌块，用于非小细胞肺癌和乳腺癌相关药物开发；2) 在 PROTAC 技术中作为连接配体的组成部分；3) 用于荧光探针的合成，研究细胞内激酶活性动态变化；4) 作为有机合成中的多官能团化模板，通过 Suzuki 偶联等反应进一步衍生化。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20°C 下避光保存于干燥环境中，长期储存需充入惰性气体保护。开封后建议分装使用以避免反复冻融。实验操作时需在通风橱中进行，佩戴防护手套及护目镜。溶解推荐使用预冷的 DMSO (浓度 $\leq 10\text{ mM}$)，水溶液需现配现用。避免与强氧化剂或强酸接触，以防酯键水解。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，核磁共振 (^1H NMR、 ^{13}C NMR) 和质谱 (HRMS) 验证结构。安全数据：急性毒性 (LD50 大鼠口服) > 500 mg/kg，属于刺激性化学品。接触皮肤或眼睛时立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物处理需符合危险有机化学品处置规范，禁止直接排入下水道。

(注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件进一步验证。)