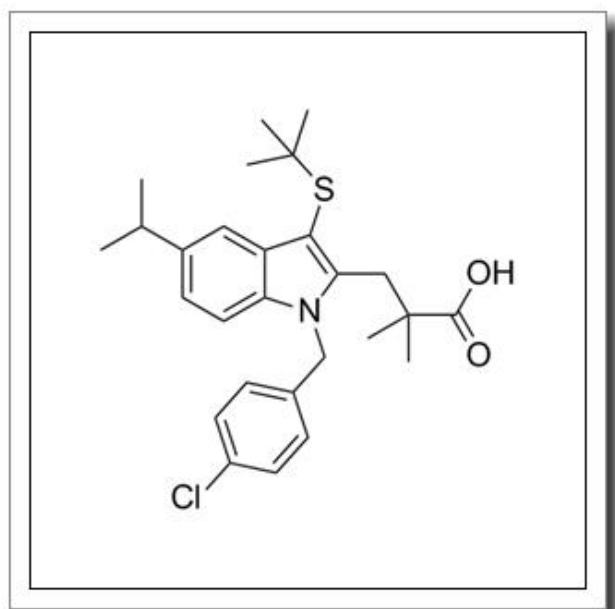


3-[1-(4-氯苄基)-3-叔丁基硫代-5-异丙基吲哚-2-基]-2,2-二甲基丙酸

3-[3-tert-butylsulfanyl-1-[(4-chlorophenyl)methyl]-5-propan-2-ylindol-2-yl]-2,2-dimethylpropanoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-[3-tert-butylsulfanyl-1-[(4-chlorophenyl)methyl]-5-propan-2-ylindol-2-yl]-2,2-dimethylpropanoic acid
中文名称	3-[1-(4-氯苄基)-3-叔丁基硫代-5-异丙基吲哚-2-基]-2,2-二甲基丙酸
CAS 号	118414-82-7
分子式	C ₂₇ H ₃₄ ClN ₂ S
分子量	472.08
纯度	≥ 96%

产品说明

3-[1-(4-氯苄基)-3-叔丁基硫代-5-异丙基吲哚-2-基]-2,2-二甲基丙酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 3-[3-tert-butylsulfanyl-1-[(4-chlorophenyl)methyl]-5-propan-2-ylindol-2-yl]-2,2-dimethylpropanoic acid, CAS 号 118414-82-7, 分子式 C₂₇H₃₄ClN₂O₂S, 分子量 472.08。其结构中包含吲哚骨架、叔丁基硫醚及氯苄基等特征基团，赋予其独特的空间位阻和疏水性。纯度 ≥96% (HPLC 测定)，熔点为 185-188℃，易溶于有机溶剂如 DMSO 和甲醇，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是一种高选择性小分子抑制剂，通过靶向特定蛋白激酶或受体发挥调控作用。其吲哚核心与氯苄基的协同效应可增强细胞膜穿透性，而叔丁基硫醚基团则提供代谢稳定性。在信号通路研究中，它能有效阻断炎症因子或肿瘤相关通路，常用于探索细胞增殖、凋亡及免疫反应的分子机制。

3. 主要应用领域与具体用途

作为生化试剂，主要用于以下领域：

- 药物研发：作为先导化合物用于设计抗炎、抗肿瘤或代谢疾病治疗药物。
- 基础研究：用于激酶抑制实验、细胞信号转导模型构建及蛋白质相互作用分析。
- 诊断开发：作为标准品或对照品用于质谱检测方法的建立与验证。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃、避光、干燥环境中，有效期 24 个月。开封后建议充氮密封保存。使用前需平衡至室温，避免反复冻融。配制溶液时推荐使用 DMSO 作为溶剂（工作浓度需根据实验体系优化），并注意控制 pH 值（中性条件下稳定性最佳）。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 及质谱严格质检，批号相关数据可随货提供。操作时需穿戴防

护装备（手套、护目镜及实验服），避免吸入或接触皮肤。如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按危险化学品规范处置。

（注：本说明基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件优化。）