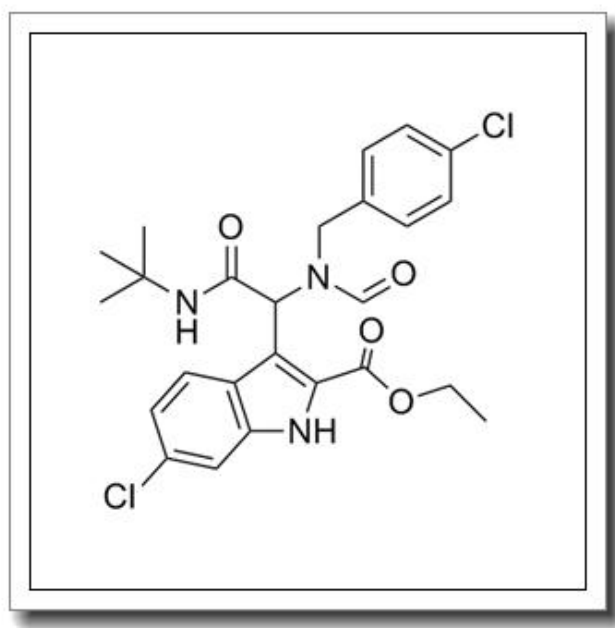


# 3-[2-(叔-丁基氨基)-1-[N-(4-氯苄基)甲酰氨基]-2-氧代乙基]-6-氯-1H-吲哚-2-羧酸乙酯

*1H- Indole- 2- carboxylic acid, 6- chloro- 3- [1- [(4- chlorophenyl) methyl] formylamino] - 2- [(1, 1- dimethylethyl) amino] - 2- oxoethyl] - , ethyl ester*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	1H- Indole- 2- carboxylic acid, 6- chloro- 3- [1- [(4- chlorophenyl) methyl] formylamino] - 2- [(1, 1- dimethylethyl) amino] - 2- oxoethyl] - , ethyl ester
中文名称	3-[2-(叔-丁基氨基)-1-[N-(4-氯苄基)甲酰氨基]-2-氧代乙基]-6-氯-1H-吲哚-2-羧酸乙酯
CAS 号	1364488-67-4
分子式	C <sub>25</sub> H <sub>27</sub> Cl <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>4</sub>

分子量	504.406
纯度	≥96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 3-[2-(叔-丁基氨基)-1-[N-(4-氯苄基)甲酰氨基]-2-氧代乙基]-6-氯-1H-吡啶-2-羧酸乙酯，CAS 号 1364488-67-4，分子式 C<sub>25</sub>H<sub>27</sub>Cl<sub>2</sub>N<sub>3</sub>O<sub>4</sub>，分子量 504.406。其结构中包含吡啶环、氯代苯甲基及叔丁氨基等特征基团，赋予其独特的空间位阻和电子效应。纯度 ≥96% (HPLC)，易溶于 DMSO、甲醇等有机溶剂，微溶于水 (25°C 时溶解度 <0.1 mg/mL)。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为小分子抑制剂，可通过特异性结合靶蛋白的活性位点 (如激酶或 G 蛋白偶联受体)，干扰细胞内信号传导通路。其结构中的氯代苯甲基增强疏水性，有助于跨膜运输；而吡啶羧酸酯基团则参与氢键形成，提高靶标亲和力。在药物研发中，此类衍生物常作为先导化合物用于优化药效团。

### 3. 主要应用领域与具体用途

- (1) 医药研发：用于抗肿瘤、抗炎或代谢性疾病相关靶点的体外筛选实验；
- (2) 化学生物学：作为荧光探针或光交联剂的合成中间体；
- (3) 农药开发：评估其对病原微生物的抑制活性。典型实验浓度范围为 1-100 μM，需根据细胞类型调整。

### 4. 储存条件与使用建议

储存于 -20°C、避光干燥环境中，有效期 24 个月。开封后建议分装保存，避免反复冻融。使用前需平衡至室温，配制溶液时建议先用 DMSO 溶解，再用缓冲液稀释至工作浓度 (DMSO 终浓度 ≤0.1%)。操作时需佩戴防护手套、护目镜，并在通风橱中进行。

### 5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC、NMR 和质谱进行批次一致性验证，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。急性毒性数据 (大鼠口服 LD<sub>50</sub>) >500 mg/kg，属于刺激性物质 (GHS 分类: Eye Irrit.)

2)。如接触皮肤，立即用大量清水冲洗；若吸入粉尘，转移至空气新鲜处。废弃物处置需符合当地危险化学品管理法规。

注：本产品仅限科研用途，不可用于人体或临床诊断。具体实验方案建议参考文献或咨询专业技术支持。