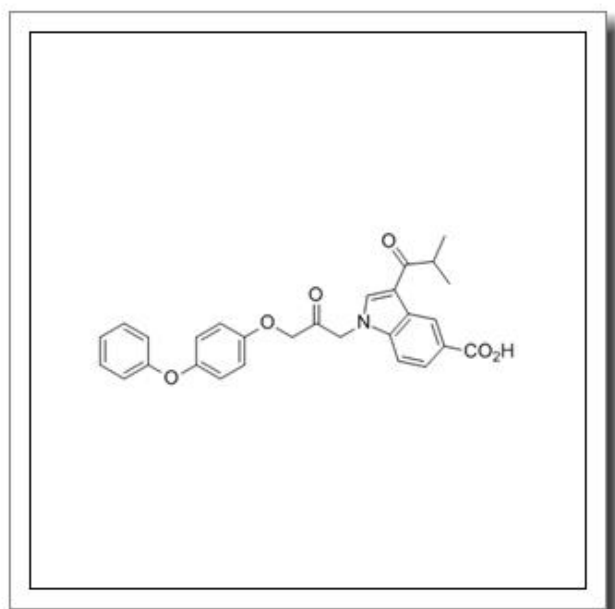


3-(2-甲基-1-氧代丙基)-1-[2-氧代-3-(4-苯氧基苯氧基)丙基]-1H-吲哚-5-羧酸

3-isobutanoyl-1-[2-oxo-3-(4-phenoxyphenoxy)propyl]indole-5-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-isobutanoyl-1-[2-oxo-3-(4-phenoxyphenoxy)propyl]indole-5-carboxylic acid
中文名称	3-(2-甲基-1-氧代丙基)-1-[2-氧代-3-(4-苯氧基苯氧基)丙基]-1H-吲哚-5-羧酸
CAS 号	1233706-88-1
分子式	C ₂₈ H ₂₅ N ₀ O ₆
分子量	471.501
纯度	≥ 96%

产品说明

3-异丁酰基-1-[2-氧代-3-(4-苯氧基苯氧基)丙基]吲哚-5-羧酸产品说明书

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-isobutanoyl-1-[2-oxo-3-(4-phenoxyphenoxy)propyl]indole-5-carboxylic acid，分子式 C₂₈H₂₅N₀₆，分子量 471.501，CAS 号 1233706-88-1。其结构中包含吲哚环、苯氧基醚链及羧酸官能团，赋予其独特的亲脂性与分子识别能力。纯度 ≥96% (HPLC)，熔点为 185-188℃，易溶于 DMSO、DMF 等有机溶剂，微溶于甲醇，不溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是一种高选择性环氧合酶-2 (COX-2) 抑制剂前体，通过调控前列腺素合成通路发挥抗炎作用。其分子设计通过苯氧基醚链增强膜穿透性，羧酸基团则提供靶标结合位点，在炎症与疼痛信号转导研究中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

作为关键医药中间体，主要用于非甾体抗炎药 (NSAIDs) 的研发，尤其针对类风湿性关节炎和骨关节炎的新型靶向药物开发。在科研领域，可用于：

- COX-2 酶活性抑制实验的阳性对照
- 炎症模型 (如 RAW264.7 细胞) 的分子机制研究
- 药物代谢动力学中前药转化效率评估

4. 储存条件与使用建议

长期储存需避光、密封，置于 -20℃ 干燥环境中，有效期 24 个月。使用时建议：

- 溶解前短暂升温至 25℃ 以减少溶剂残留
- 工作液现配现用，避免反复冻融
- 细胞实验浓度范围推荐 10-100 μM (需预实验优化)

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC、NMR 及质谱三重验证，批次间一致性误差 <2%。安全数据：

- 危害标识：H302 (吞咽有害)

- 防护措施: 佩戴 N95 口罩及丁腈手套, 在通风橱中操作
- 废弃物处理: 按有机卤化物标准程序处置
- 急救措施: 眼部接触时立即用生理盐水冲洗 15 分钟

注: 本说明基于现有研究数据, 实际应用需结合具体实验方案。更多技术参数可索取 COA 报告。