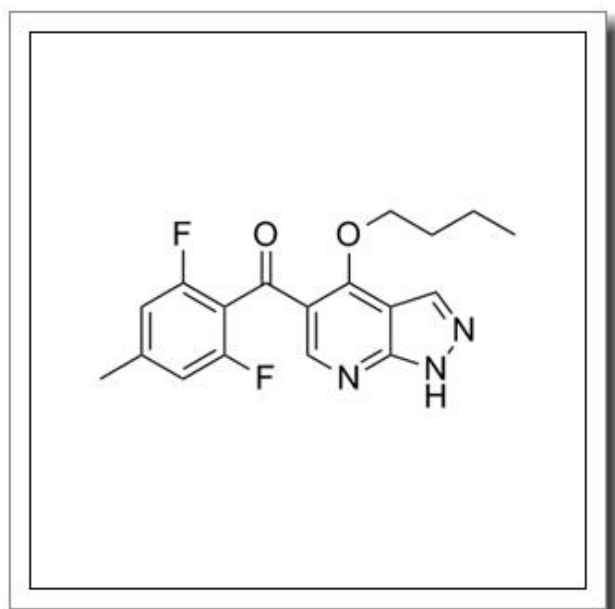


(4-丁氧基-1H-吡唑并[3,4-b]吡啶-5-基)(2,6-二氟-4-甲基苯基)-甲酮

(4-butoxy-1H-pyrazolo[3,4-b]pyridin-5-yl)-(2,6-difluoro-4-methylphenyl)methanone



产品基本信息

属性	值
化学名称	(4-butoxy-1H-pyrazolo[3,4-b]pyridin-5-yl)-(2,6-difluoro-4-methylphenyl)methanone
中文名称	(4-丁氧基-1H-吡唑并[3,4-b]吡啶-5-基)(2,6-二氟-4-甲基苯基)-甲酮
CAS 号	582315-72-8
分子式	C ₁₈ H ₁₇ F ₂ N ₃ O ₂
分子量	345.343
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品为(4-丁氧基-1H-吡唑并[3,4-b]吡啶-5-基)(2,6-二氟-4-甲基苯基)-甲酮, 化学式 C₁₈H₁₇F₂N₃O₂, 分子量 345.343, CAS 号 582315-72-8。该化合物是一种高纯度 (≥96%) 的吡唑并吡啶衍生物, 具有明确的杂环结构和芳香酮官能团。其分子中包含丁氧基、二氟苯基及吡啶环, 赋予其独特的极性、溶解性和稳定性, 适合在有机合成及药物研发中作为关键中间体。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其吡唑并吡啶核心结构, 表现出显著的生物活性潜力, 尤其在激酶抑制和信号通路调控领域具有研究价值。其分子中的二氟甲基苯基片段可增强脂溶性和细胞膜穿透性, 而吡啶酮结构可能参与氢键相互作用, 使其成为靶向药物设计的重要骨架。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域, 特别是作为小分子抑制剂或先导化合物的核心结构。具体用途包括:

- 用于激酶抑制剂类抗肿瘤药物的合成与优化
- 作为荧光探针或标记物的化学修饰基团
- 在化学生物学研究中用于蛋白-配体相互作用分析

4. 储存条件与使用建议

建议在-20° C 下避光保存, 长期储存需充惰性气体保护。开封后需干燥环境下使用, 避免反复冻融。溶解时推荐使用 DMSO 或二氯甲烷等有机溶剂, 工作浓度需根据实验体系优化。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 验证纯度 ≥96%, MS 和 NMR 确证结构。操作时需佩戴防护手套及护目镜, 避免吸入或接触皮肤。其安全数据 (SDS) 显示可能对眼睛和呼吸道有刺激性, 应在通风橱中处理。废弃物需按危险化学品规范处置。

注：以上信息基于实验室环境数据，实际应用需结合具体研究需求进一步验证。