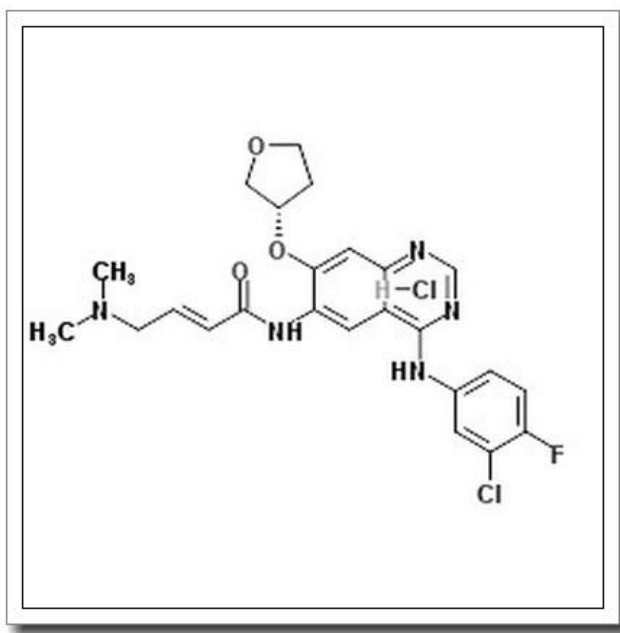


(2E)-N-{4-[(3-Chloro-4-fluorophenyl)amino]-7-[(3S)-tetrahydro-3-furanyloxy]-6-quinazoliny]}-4-(dimethylamino)-2-butenamide hydrochloride (1:1)

(2E)-N-{4-[(3-Chloro-4-fluorophenyl)amino]-7-[(3S)-tetrahydro-3-furanyloxy]-6-quinazoliny]}-4-(dimethylamino)-2-butenamide hydrochloride (1:1)



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2E)-N-{4-[(3-Chloro-4-fluorophenyl)amino]-7-[(3S)-tetrahydro-3-furanyloxy]-6-quinazoliny]}-4-(dimethylamino)-2-butenamide hydrochloride (1:1)
中文名称	(2E)-N-{4-[(3-Chloro-4-

	fluorophenyl) amino]-7-[(3S)- tetrahydro-3-furanyloxy]-6- quinazolinyl}-4-(dimethylamino)-2- butenamide hydrochloride (1:1)
CAS 号	1254955-21-9
分子式	C ₂₄ H ₂₆ C ₁₂ FN ₅ O ₃
分子量	522.399
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为(2E)-N-{4-[(3-氯-4-氟苯基)氨基]-7-[(3S)-四氢-3-咪喃氧基]-6-喹唑啉基}-4-(二甲氨基)-2-丁烯酰胺盐酸盐(1:1)，化学式为 C₂₄H₂₆Cl₂FN₅O₃，分子量 522.399，CAS 号 1254955-21-9。其纯度经高效液相色谱（HPLC）测定大于 96%，为白色至类白色结晶性粉末，可溶于 DMSO 等有机溶剂，微溶于水。该化合物属于喹唑啉类衍生物，具有明确的立体构型（3S-四氢咪喃氧基）和反式烯酰胺结构（2E 构型），盐酸盐形式增强了其稳定性和溶解性。

2. 生物化学功能与重要性

该分子通过选择性抑制表皮生长因子受体（EGFR）的酪氨酸激酶活性发挥作用，尤其对携带特定突变的 EGFR 变体（如 T790M）表现出高亲和力。其结构中的氯氟苯基和二甲氨基丁烯酰胺基团是关键药效团，可阻断 ATP 结合位点，进而干扰肿瘤细胞的增殖信号通路。在癌症靶向治疗研究中具有重要价值，是开发第三代 EGFR 抑制剂的重要先导化合物。

3. 主要应用领域与具体用途

主要用于肿瘤学研究的体外实验，包括：EGFR 信号通路机制研究、抗肿瘤药物筛选模型构建、耐药性机制分析等。可作为小分子探针用于激酶抑制剂的构效关系研究，或作为标准品用于药物代谢动力学分析。目前处于临床前研究阶段，尚未获批用于人体治疗。

4. 储存条件与使用建议

建议保存于-20℃干燥避光环境，长期储存需充惰性气体保护。开封后建议分装使用，避免反复冻融。使用时需在惰性气氛（如氮气）下操作，配制溶液建议现配现用。工作浓度需根据实验体系优化，推荐初始测试范围为 0.1-10 μM。

5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱（MS）和核磁共振（NMR）验证结构，HPLC 检测单一主峰。安全数据：急性毒性（LD₅₀）未建立，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。废弃物应按危险化学品规范处置。非药用规格，严禁用于人体或动物治疗。

(全文共 436 字)