

1-(2-Methyl-1,3-benzoxazol-6-yl)-1-(1,5-naphthyridin-4-yl)urea

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	1-(2-Methyl-1,3-benzoxazol-6-yl)-1-(1,5-naphthyridin-4-yl)urea
产品目录号	
CAS 号	792173-99-0
分子式	C17H13N5O2
分子量	319.317
纯度	>96%

产品说明

1-(2-甲基-1,3-苯并恶唑-6-基)-1-(1,5-萘啶-4-基)脲产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为高纯度有机化合物，化学名称为 1-(2-甲基-1,3-苯并恶唑-6-基)-1-(1,5-萘啶-4-基)脲，CAS 号为 792173-99-0，分子式 C₁₇H₁₃N₅O₂，分子量 319.317。其结构包含苯并恶唑与萘啶双杂环体系，通过脲键连接，形成具有平面共轭特性的刚性分子骨架。常温下呈白色至类白色结晶粉末，纯度经 HPLC 验证 ≥96%，符合科研级试剂标准。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为选择性激酶抑制剂的核心结构，可通过竞争性结合 ATP 位点调控信号通路。其萘啶环提供关键氢键供体/受体，苯并恶唑模块增强疏水相互作用，使分子对特定激酶（如 ALK、EGFR 突变体）表现出纳摩尔级抑制活性。在靶点验证与药物筛选中具有重要工具价值。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于肿瘤学研究领域：

- 激酶抑制剂先导化合物优化
- 体外酶活性检测（IC₅₀ 测定）
- 细胞水平通路抑制实验（建议工作浓度 0.1-10 μM）
- 动物模型药效学评估（需配合制剂优化）

非科研用途需遵守相关法规限制。

4. 储存条件与使用建议

长期储存需置于-20℃、避光、干燥环境中，开封后建议充氮保存。溶解性数据提示：DMSO（50 mg/mL）、乙醇（有限溶解），水溶性差。实验前需进行超声助溶，建议配制 10 mM DMSO 母液分装保存，避免反复冻融。

5. 质量控制与安全信息

批次质检报告包含 HPLC 纯度（≥96%）、LC-MS 分子量验证及水分含量

($\leq 0.5\%$)。安全操作需佩戴防护装备, MSDS 显示该物质可能造成眼刺激 (GHS 分类 Category 2), 不慎接触时立即用大量清水冲洗。废弃物处置应参照危险化学品规范。

本产品仅限专业研究人员使用, 不适用于诊断或治疗用途。具体实验方案建议查阅最新文献或咨询技术支持。