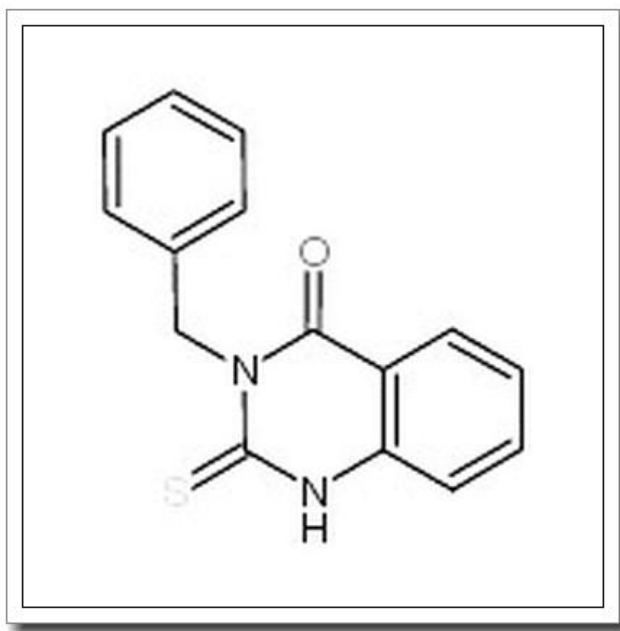


3-苄基-2-硫基-2,3-二氢-4(1H)-喹唑烷酮

3-benzyl-2-sulfanylidene-1H-quinazolin-4-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-benzyl-2-sulfanylidene-1H-quinazolin-4-one
中文名称	3-苄基-2-硫基-2,3-二氢-4(1H)-喹唑烷酮
CAS 号	13906-05-3
分子式	C ₁₅ H ₁₂ N ₂ O ₂ S
分子量	268.334
纯度	>96%

产品说明

3-苄基-2-硫基-2,3-二氢-4(1H)-喹唑烷酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 3-benzyl-2-sulfanylidene-1H-quinazolin-4-one, CAS 号为 13906-05-3, 分子式 C₁₅H₁₂N₂O₂S, 分子量 268.334, 是一种含硫喹唑啉酮衍生物。其结构特征为喹唑啉酮母核的 2 位被硫酮基取代, 3 位连接苄基侧链, 赋予分子独特的电子分布和空间构型。常温下呈白色至淡黄色结晶性粉末, 纯度 >96% (HPLC), 可溶于 DMSO、DMF 等极性有机溶剂, 微溶于醇类, 不溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为喹唑啉酮类骨架的修饰物, 具有显著的生物活性潜力。硫酮基团可参与金属配位或氧化还原反应, 苄基结构则增强脂溶性, 利于跨膜传输。其分子结构可作为激酶抑制剂、抗菌剂或抗肿瘤药物的先导化合物, 在药物研发中常用于靶点验证和结构活性关系 (SAR) 研究。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本品常用于以下方向: 一是作为 EGFR、VEGFR 等酪氨酸激酶抑制剂的合成中间体; 二是在抗菌剂开发中用于构建含硫杂环核心结构; 三是在化学生物学中用于蛋白质共价修饰探针的制备。此外, 也可作为有机合成砌块用于构建更复杂的杂环体系。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20℃ 干燥环境中, 避免光照及湿度 >60%。开封后需充氮保护以延长稳定性。实验操作应在通风橱中进行, 佩戴防护手套及护目镜。溶解时优先选用 DMSO (浓度建议 ≤10mM), 避免反复冻融。工作液需现配现用, 长期储存可能导致硫酮基氧化。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 及质谱三重验证, 符合药物研发级标准。急性毒性数据 (LD₅₀ 大鼠口服) 为 >500mg/kg, 属于刺激性化学品。接触皮肤或眼睛时需立即用大量清

水冲洗 15 分钟并就医。废弃物处置应遵守当地危险化学品管理条例，不可直接排入下水道。

（注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验体系进一步优化。）