

3,5,7-Trihydroxy-8-(3-methyl-2-buten-1-yl)-2-[4-(trifluoromethyl)phenyl]-4H-chromen-4-one

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	3, 5, 7-Trihydroxy-8-(3-methyl-2-buten-1-yl)-2-[4-(trifluoromethyl)phenyl]-4H-chromen-4-one
产品目录号	
CAS 号	1446712-19-1
分子式	C ₂₁ H ₁₇ F ₃ O ₅
分子量	406. 352
纯度	>96%

产品说明

3, 5, 7-三羟基-8-(3-甲基-2-丁烯-1-基)-2-[4-(三氟甲基)苯基]-4H-苯并吡喃-4-酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为高纯度黄酮类衍生物，化学名称 3, 5, 7-Trihydroxy-8-(3-methyl-2-buten-1-yl)-2-[4-(trifluoromethyl)phenyl]-4H-chromen-4-one, CAS 号 1446712-19-1, 分子式 C₂₁H₁₇F₃O₅, 分子量 406. 352。其结构特征为苯并吡喃酮核心骨架，含异戊烯基侧链和三氟甲基苯基取代基，赋予其独特的疏水性和电子效应。产品经 HPLC 验证纯度>96%，常温下呈淡黄色至白色结晶粉末，需避光保存。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物通过黄酮母核的羟基修饰展现多重生物活性，包括选择性激酶抑制、抗氧化及抗炎作用。三氟甲基苯基的引入显著增强其与靶蛋白的疏水相互作用，而异戊烯基侧链可能影响细胞膜穿透性。研究表明，其结构特性对调控 NF- κ B、MAPK 等信号通路具有潜在价值，在药物先导化合物开发中备受关注。

3. 主要应用领域与具体用途

作为小分子探针，主要用于肿瘤学、免疫学领域的机制研究，特别适用于：

- (1) 激酶抑制剂筛选实验中的阳性对照
- (2) 炎症相关信号通路研究的工具化合物
- (3) 结构-活性关系 (SAR) 研究的核心骨架
- (4) 氟代黄酮类新药开发的中间体

4. 储存条件与使用建议

长期储存需置于-20℃干燥环境，短期使用可存放于 4℃真空干燥器。溶解建议优先选用 DMSO (浓度≤10mM)，避免反复冻融。工作液需现配现用，水溶液体系建议添加 0.1%BSA 提高稳定性。实验操作需在惰性气体保护下进行以防氧化。

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 (≤0.5%)

数据。本品属于刺激性化学品，操作时需佩戴防护手套及护目镜，MSDS 显示其急性毒性类别为 4 级（LD50>2000mg/kg）。废弃物处置应遵守有机氟化合物处理规范，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

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优化条件。更多技术参数可索取 COA 文件。