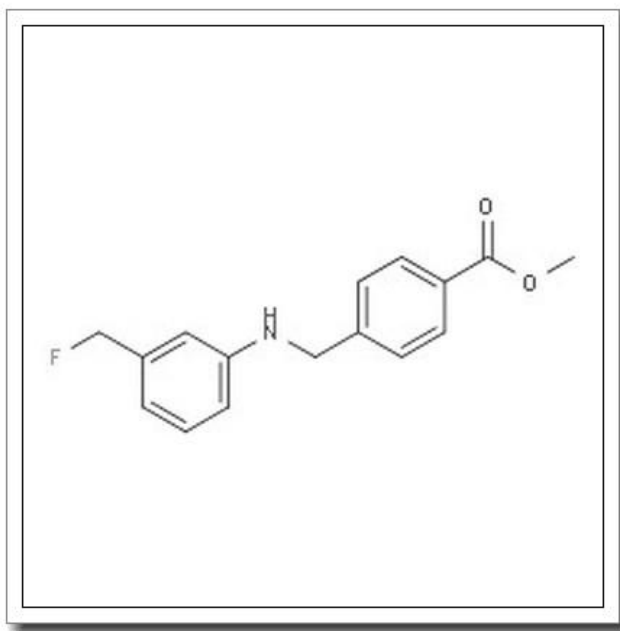


4-[[[3-(氟甲基)苯基]氨基]甲基]苯甲酸甲酯

Methyl 4-[[[3-(FluoroMethyl)phenyl]aMino]Methyl]benzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 4-[[[3-(FluoroMethyl)phenyl]aMino]Methyl]benzoate
中文名称	4-[[[3-(氟甲基)苯基]氨基]甲基]苯甲酸甲酯
CAS 号	1820734-56-2
分子式	C16H16FN02
分子量	273.302
纯度	>96%

产品说明

4-[[[3-(氟甲基)苯基]氨基]甲基]苯甲酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 Methyl 4-[[[3-(FluoroMethyl)phenyl]amino]Methyl]benzoate, CAS 号为 1820734-56-2, 分子式为 C₁₆H₁₆FN₂O₂, 分子量 273.302。其为白色至类白色结晶性粉末, 纯度>96%, 可溶于常见有机溶剂如 DMSO、甲醇和乙腈, 微溶于水。结构中含氟甲基和苯甲酸甲酯基团, 具有显著的疏水性和电子效应, 适合作为医药中间体或生化探针的合成原料。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物通过苯胺基与苯甲酸酯的共轭结构, 可参与亲核取代、缩合等反应, 其氟甲基基团能增强代谢稳定性, 在药物设计中常用于靶向酶或受体的修饰。在激酶抑制剂和 G 蛋白偶联受体 (GPCR) 配体的开发中具有潜在应用价值, 尤其适用于抗肿瘤和抗炎药物的先导化合物优化。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域:

- 作为小分子抑制剂的核心骨架, 用于癌症靶向治疗药物的合成。
- 在荧光标记或放射性标记实验中, 作为连接子或载体分子。
- 用于结构-活性关系 (SAR) 研究, 探索氟原子引入对生物活性的影响。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20° C、避光、干燥的惰性气体环境中, 有效期 24 个月。开封后建议分装保存, 避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套及护目镜。溶解前可短暂超声处理以提高溶解度, 推荐工作浓度为 1-10 mM (溶剂为 DMSO)。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 和质谱 (MS) 双重验证纯度, 批号关联完整分析证书 (COA)。该化合物

对眼睛和皮肤有轻微刺激性，操作后需彻底清洗接触部位。若吸入或误服，应立即就医并提供 CAS 号信息。废弃物处置需符合当地有机氟化合物处理规范。

（注：本说明基于现有实验数据，具体应用需进一步验证。产品仅限科研用途，不可用于人体或动物实验。）