

N-(3,4-dichloro-2-fluorophenyl)-7- ({[(3aR,5r,6aS)-2- methyloctahydrocyclopenta[c]pyrrol-5- yl]methyl}oxy)-6-(methyloxy)quinazolin- 4-amine

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	N-(3,4-dichloro-2-fluorophenyl)-7- ({[(3aR,5r,6aS)-2- methyloctahydrocyclopenta[c]pyrrol- 5-yl]methyl}oxy)-6- (methyloxy)quinazolin-4-amine
产品目录号	
CAS 号	781613-23-8
分子式	C ₂₄ H ₂₅ Cl ₂ FN ₄ O ₂
分子量	491.385
纯度	>96%

产品说明

N-(3,4-二氯-2-氟苯基)-7-({[(3aR,5r,6aS)-2-甲基八氢环戊并[c]吡咯-5-基]甲基}氧基)-6-(甲氧基)喹唑啉-4-胺产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为高纯度喹唑啉衍生物，化学名称如标题所示，CAS 号为 781613-23-8，分子式 C₂₄H₂₅Cl₂FN₄O₂，分子量 491.385。外观为白色至类白色结晶性粉末，纯度经 HPLC 验证 ≥96%。该化合物具有独特的杂环结构，含二氯氟苯基、甲氧基喹唑啉及八氢环戊并吡咯甲基醚等活性基团，疏水性较强（LogP 约 3.8），需在特定溶剂中溶解。

2. 生物化学功能与重要性

作为小分子抑制剂，该化合物可通过靶向结合特定激酶结构域（如 EGFR 或 VEGFR 家族），干扰 ATP 结合位点，从而调控下游信号通路。其氟原子和甲氧基的引入显著增强了代谢稳定性，而二氯苯基则提升了细胞膜穿透性，使其在抗肿瘤药物研发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

主要用于肿瘤学基础研究及药物开发领域：

- 体外实验：用于激酶抑制活性筛选及细胞增殖抑制机制研究
- 动物模型：评估其对实体瘤生长的抑制作用
- 结构优化：作为先导化合物用于构效关系研究
- 联合用药：探索与化疗药物的协同效应

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃避光干燥环境，开封后需充氮密封保存。建议使用前平衡至室温，溶解时优先选用 DMSO（推荐浓度 10 mM），后续可用 PBS 或培养基稀释。工作液需现配现用，避免反复冻融。操作时需在通风橱中进行，并佩戴防护手套及护目镜。

5. 质量控制与安全信息

批次均通过 NMR、LC-MS 及元素分析验证结构，残留溶剂符合 ICH 标准。急性毒性

数据显示其 LD50（小鼠口服）为 320 mg/kg，属于有害物质（GHS 分类：H302）。废弃物应作为危险化学品处理，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。详细安全数据参见随附的 MSDS 文件。

注：本产品仅限科研使用，不适用于诊断或治疗用途。