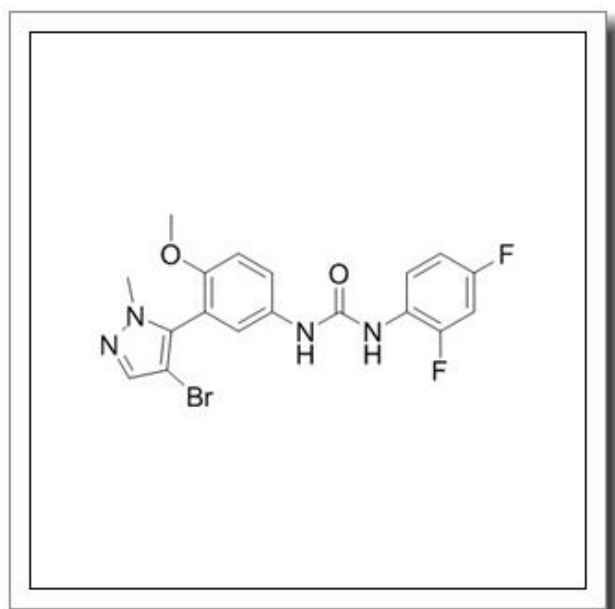


1-[3-(4-溴-1-甲基-1H-吡唑-5-基)-4-甲氧基苯基]-3-(2,4-二氟苯基)脲

1-[3-(4-bromo-2-methylpyrazol-3-yl)-4-methoxyphenyl]-3-(2,4-difluorophenyl)urea



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-[3-(4-bromo-2-methylpyrazol-3-yl)-4-methoxyphenyl]-3-(2,4-difluorophenyl)urea
中文名称	1-[3-(4-溴-1-甲基-1H-吡唑-5-基)-4-甲氧基苯基]-3-(2,4-二氟苯基)脲
CAS 号	839713-36-9
分子式	C ₁₈ H ₁₅ BrF ₂ N ₄ O ₂
分子量	437.238
纯度	≥96%

产品说明

1-[3-(4-溴-1-甲基-1H-吡唑-5-基)-4-甲氧基苯基]-3-(2,4-二氟苯基)脲产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶粉末，化学名称为 1-[3-(4-溴-2-甲基吡唑-3-基)-4-甲氧基苯基]-3-(2,4-二氟苯基)脲，CAS 号 839713-36-9。分子式为 $C_{18}H_{15}BrF_2N_4O_2$ ，分子量 437.238，纯度 $\geq 96\%$ 。该化合物属于芳基脲类衍生物，结构中包含溴代甲基吡唑基团和甲氧基苯基单元，具有特定的空间构型和电子分布特性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为小分子抑制剂，可通过选择性结合靶蛋白激酶的 ATP 结合位点发挥作用。其独特的二氟苯基结构增强了细胞膜穿透性，而溴代吡唑基团则提供了特定的分子识别位点。在信号转导研究中，它能有效阻断特定激酶活性，是研究细胞增殖和凋亡通路的重要工具分子。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于肿瘤生物学研究和药物开发领域。具体用途包括：作为激酶抑制剂用于体外酶活性测定；用于建立肿瘤细胞模型研究耐药机制；作为先导化合物进行结构优化研究；在分子对接实验中作为参考配体。该分子特别适用于 HER 家族激酶相关研究。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20°C 干燥避光条件下保存，长期储存需充惰性气体保护。使用前需平衡至室温并保持干燥。溶解时建议先用 DMSO 配制母液（浓度不超过 10mM），再用缓冲液稀释至工作浓度。避免反复冻融，溶液现配现用。实验操作应在通风橱中进行。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，MS 和 NMR 验证结构正确性。安全数据：急性毒性 LD50（大鼠口服） $>500\text{mg}/\text{kg}$ 。操作时需佩戴防护手套和护目镜，避免吸入粉尘。

如接触皮肤，立即用大量清水冲洗。废弃物应按危险化学品处理规范处置。详细安全信息请参阅随附的 MSDS 文件。