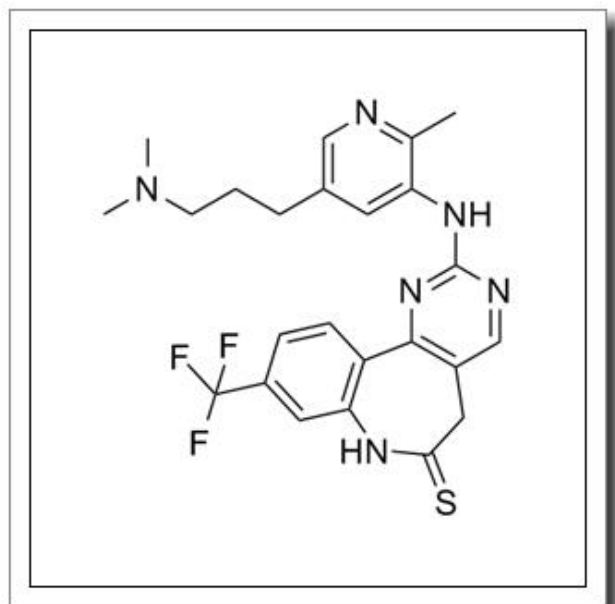


2-[[5-[3-(二甲基氨基)丙基]-2-甲基-3-吡啶基]氨基]-5,7-二氢-9-(三氟甲基)-6H-嘧啶并[5,4-D][1]苯并氮杂卓-6-硫酮

2-[[5-[3-(dimethylamino)propyl]-2-methylpyridin-3-yl]amino]-9-(trifluoromethyl)-5,7-dihydropyrimido[5,4-d][1]benzazepine-6-thione



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-[[5-[3-(dimethylamino)propyl]-2-methylpyridin-3-yl]amino]-9-(trifluoromethyl)-5,7-dihydropyrimido[5,4-d][1]benzazepine-6-thione
中文名称	2-[[5-[3-(二甲基氨基)丙基]-2-甲基-3-吡啶基]氨基]-5,7-二氢-9-(三氟甲基)-6H-嘧啶并[5,4-D][1]苯并氮杂卓

	卓-6-硫酮
CAS 号	1228960-69-7
分子式	C ₂₄ H ₂₅ F ₃ N ₆ S
分子量	486.556
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品为 2-[[5-[3-(二甲基氨基)丙基]-2-甲基-3-吡啶基]氨基]-5,7-二氢-9-(三氟甲基)-6H-嘧啶并[5,4-D][1]苯并氮杂卓-6-硫酮 (CAS 号: 1228960-69-7), 是一种具有复杂杂环结构的有机化合物。其分子式为 C₂₄H₂₅F₃N₆S, 分子量为 486.556, 纯度 ≥96%。该化合物含三氟甲基、硫酮基团及多氮杂环结构, 表现出显著的疏水性和电子效应, 适合作为生物活性分子或中间体用于药物研发。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其独特的结构特征, 可能作为激酶抑制剂或信号通路调节剂发挥作用。嘧啶并苯并氮杂卓骨架常见于抗癌及抗炎药物设计中, 而三氟甲基的引入可增强代谢稳定性和靶标结合能力。其硫酮基团可能参与金属离子螯合或共价修饰, 在酶抑制或蛋白质相互作用研究中具有潜在价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发领域, 具体包括:

- 作为激酶抑制剂候选分子, 用于肿瘤或炎症性疾病的新药筛选;
- 作为化学探针, 研究相关生物靶点的结构与功能关系;
- 在药物化学中作为关键中间体, 用于进一步结构修饰与优化。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光保存, 干燥环境中密封存放。使用时需在惰性气体 (如氮气) 保护下操作, 避免反复冻融。溶解性测试表明其易溶于 DMSO、DMF 等极性有机溶剂, 水溶性较低。实验操作需在通风橱中进行, 并佩戴防护手套及护目镜。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, 核磁共振 (NMR) 及质谱 (MS) 验证结构。安全信息提示: 该化合物可能对眼睛、皮肤及呼吸系统有刺激性, 操作时应避免直接接触。如发生意外暴露, 需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地化学品管理法规。

(全文共 436 字)