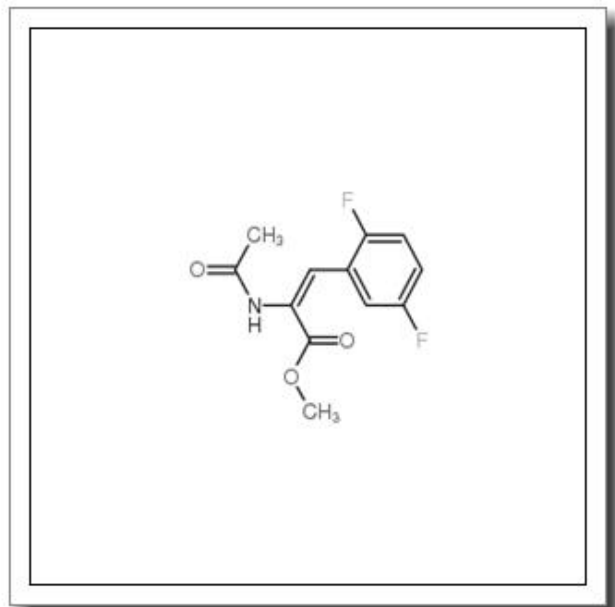


2-乙酰基氨基-3-(2,5-二氟苯基)丙烯酸 甲酯

methyl 2-acetamido-3-(2,5-difluorophenyl)prop-2-enoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 2-acetamido-3-(2,5-difluorophenyl)prop-2-enoate
中文名称	2-乙酰基氨基-3-(2,5-二氟苯基)丙烯酸甲酯
CAS 号	959246-87-8
分子式	C ₁₂ H ₁₁ F ₂ N ₃ O ₃
分子量	255.217
纯度	≥96%

产品说明

2-乙酰氨基-3-(2,5-二氟苯基)丙烯酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 methyl 2-acetamido-3-(2,5-difluorophenyl)prop-2-enoate, 是一种含氟芳香族丙烯酸酯衍生物, CAS 号为 959246-87-8。其分子式为 C₁₂H₁₁F₂N₃O₃, 分子量 255.217, 常温下为白色至类白色结晶或粉末状固体。结构中包含乙酰氨基、丙烯酸甲酯基团及 2,5-二氟苯基, 赋予其独特的化学反应活性与生物相容性。产品纯度 ≥96%, 需通过 HPLC 验证。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为小分子抑制剂前体或中间体, 可通过迈克尔加成等反应参与生物活性分子构建。二氟苯基的引入增强了其脂溶性和膜穿透能力, 而丙烯酸酯结构可作为共价结合位点, 在靶向药物设计中用于不可逆抑制剂的开发。其在调节酶活性或信号通路方面具有潜在价值, 尤其适用于含氟药物的结构优化。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于药物研发领域, 特别是抗肿瘤、抗炎及中枢神经系统药物的合成。具体用途包括: 1) 作为 EGFR 或激酶抑制剂的关键中间体; 2) 用于构建含氟类抗代谢药物; 3) 在 PET 示踪剂开发中作为标记前体。实验室研究中可用于探索氟原子对药物代谢动力学的影响。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20°C、避光、干燥条件下密封保存, 长期储存需充惰性气体保护。使用时需在干燥惰性氛围 (如氮气手套箱) 中操作, 避免接触水分或强氧化剂。溶解性测试表明其易溶于 DMSO、DMF 等极性有机溶剂, 推荐使用前进行超声助溶。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 及质谱严格质检, 批次报告可随货提供。安全数据表明其具有刺激性, 操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。如接触皮肤, 应立即用大量

清水冲洗 15 分钟。废弃物处理需符合有机氟化合物处置规范，禁止直接排放至下水道。

注：本说明仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。具体实验方案建议参考文献或咨询专业技术支持。