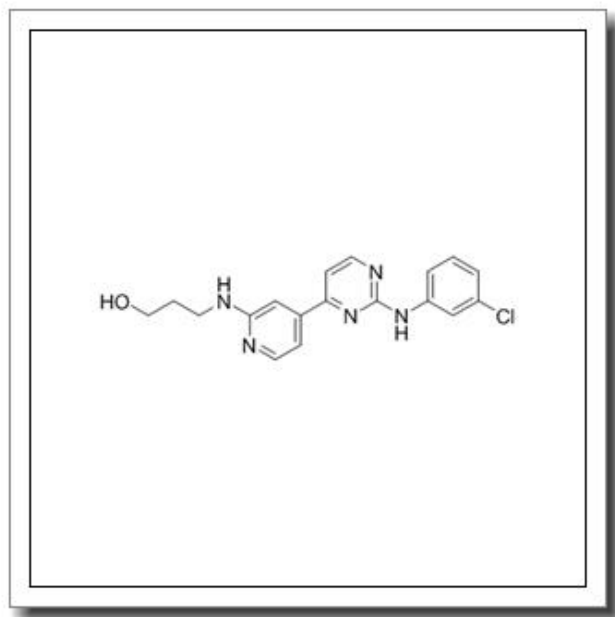


# 3-[[4-[2-[(3-氯苯基)氨基]-4-嘧啶基]-2-吡啶基]氨基]-1-丙醇

*3-[[4-[2-(3-chloroanilino)pyrimidin-4-yl]pyridin-2-yl]amino]propan-1-ol*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	3-[[4-[2-(3-chloroanilino)pyrimidin-4-yl]pyridin-2-yl]amino]propan-1-ol
中文名称	3-[[4-[2-[(3-氯苯基)氨基]-4-嘧啶基]-2-吡啶基]氨基]-1-丙醇
CAS 号	164658-13-3
分子式	C <sub>18</sub> H <sub>18</sub> ClN <sub>5</sub> O
分子量	355.821
纯度	≥96%

## 产品说明

### 3-[[4-[2-(3-氯苯基)氨基]嘧啶-4-基]吡啶-2-基]氨基]-1-丙醇产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 3-[[4-[2-(3-氯苯基)氨基]嘧啶-4-基]吡啶-2-基]氨基]-1-丙醇，CAS 号为 164658-13-3，分子式 C<sub>18</sub>H<sub>18</sub>ClN<sub>5</sub>O，分子量 355.821。其结构中包含嘧啶环、吡啶环及氯苯基团，赋予其独特的生物活性与化学稳定性。纯度 ≥96%，可通过 HPLC 验证。该化合物在常温下稳定，微溶于水，易溶于 DMSO、甲醇等有机溶剂。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为小分子抑制剂，该化合物能特异性靶向特定激酶信号通路（如 EGFR 家族），通过竞争性结合 ATP 位点抑制酶活性。其氯苯基与嘧啶环结构对靶标选择性具有关键作用，而末端羟丙基侧链可增强水溶性。这类抑制剂在细胞增殖、分化调控研究具有重要价值，尤其适用于肿瘤生物学机制探索。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于以下领域：

- 3.1 药物研发——作为先导化合物用于抗肿瘤药物开发，特别是针对酪氨酸激酶依赖性癌症（如非小细胞肺癌）；
- 3.2 分子生物学研究——用于构建激酶信号通路模型，探究磷酸化级联反应机制；
- 3.3 体外实验——常配制成 5-10 mM DMSO 母液，用于细胞水平抑制实验（IC<sub>50</sub> 测定等）。

#### 4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存条件：建议避光保存于 -20℃ 干燥环境中，有效期 24 个月。开封后需充氮密封；
- 4.2 使用建议：溶解前需恢复至室温以避免冷凝水影响。工作浓度需通过预实验确定，推荐使用无血清培养基稀释母液；

4.3 废弃物处理：按危险有机化合物标准程序处置，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

## 5. 质量控制与安全信息

5.1 质量控制：每批次产品均经 HPLC (UV 254 nm) 检测，提供 COA 报告。残留溶剂符合 ICH Q3C 标准；

5.2 安全数据：根据 GHS 分类，该产品具刺激性 (H315-H319)，操作时需佩戴护目镜与防尘口罩。急性毒性数据 (大鼠口服 LD50 > 2000 mg/kg) 提示中等风险，若接触眼睛需立即用生理盐水冲洗 15 分钟；

5.3 运输规范：按非危险化学品运输，但建议使用冰袋维持低温环境。

注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验体系优化。更多技术参数可索取 MSDS 文档。