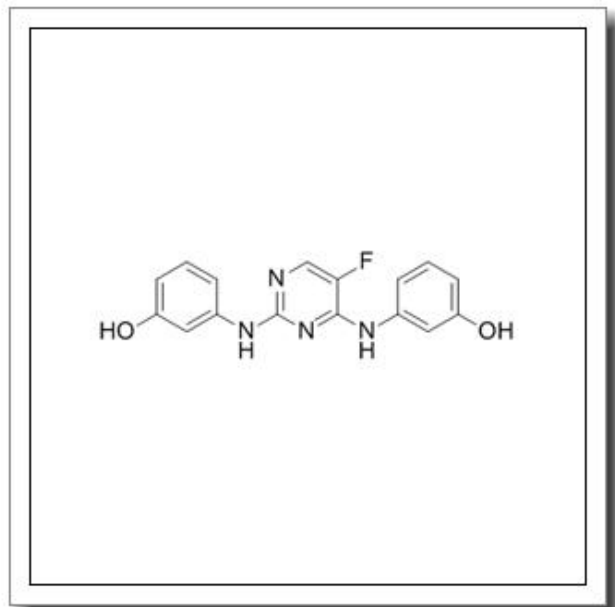


3,3'-[(5-氟-2,4-嘧啶二基)二亚胺]二[苯酚]

3,3'-[(5-Fluoro-2,4-pyrimidinediyl)diimino]diphenol



产品基本信息

属性	值
化学名称	3,3'-[(5-Fluoro-2,4-pyrimidinediyl)diimino]diphenol
中文名称	3,3'-[(5-氟-2,4-嘧啶二基)二亚胺]二[苯酚]
CAS 号	575474-82-7
分子式	C ₁₆ H ₁₃ FN ₄ O ₂
分子量	312.298
纯度	≥96%

产品说明

3, 3'-[(5-氟-2, 4-嘧啶二基)二亚胺]二[苯酚]产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至淡黄色结晶粉末，化学名称为 3, 3'-[(5-Fluoro-2, 4-pyrimidinediyl)diimino]diphenol，CAS 号 575474-82-7，分子式 C₁₆H₁₃FN₄O₂，分子量 312.298。纯度 ≥96%，具有嘧啶环与苯酚结构共轭的特征，紫外吸收峰位于 280-320 nm。其结构中含氟原子与酚羟基，赋予化合物独特的电子效应与氢键结合能力，易溶于 DMSO、DMF 等极性有机溶剂，微溶于水（25℃溶解度 <0.1 mg/mL）。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为嘧啶类衍生物，可通过氢键和 $\pi-\pi$ 堆积作用与生物大分子（如 DNA/RNA、蛋白质）特异性结合。氟原子的引入增强了其细胞膜穿透性及代谢稳定性，在靶向药物设计中具有重要价值。其分子中的双酚结构可作为抗氧化剂或酶抑制剂前体，在信号通路调控研究中表现潜在活性。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发与生物化学研究领域：

- (1) 抗肿瘤药物中间体，用于构建酪氨酸激酶抑制剂或拓扑异构酶靶向化合物；
- (2) 荧光探针合成原料，其嘧啶核心可作为核酸标记物的荧光增强基团；
- (3) 抗氧化活性研究，酚羟基可清除自由基，用于氧化应激机制实验；
- (4) 分子对接研究中的标准配体，用于计算机辅助药物设计验证。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃避光干燥环境，充氮密封保存（建议分装使用）。开封后需在干燥器中保存，避免吸湿。使用时需佩戴防护手套及护目镜，溶解建议采用梯度稀释法（先溶于 DMSO 再缓冲液稀释），工作浓度需通过预实验确定。与强氧化剂、强酸/碱分开存放。

5. 质量控制与安全信息

HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，重金属含量 < 10 ppm，水分含量 $\leq 0.5\%$ 。安全数据：急性毒性（大鼠口服 LD50） > 500 mg/kg，皮肤刺激性类别 3。废弃物处理需符合危险化学品规范，建议通过专业机构焚烧处置。MSDS 备索，实验操作应在通风橱中进行。

注：本产品仅限科研用途，不可用于临床或食品领域。具体应用方案需结合文献与实验条件优化。