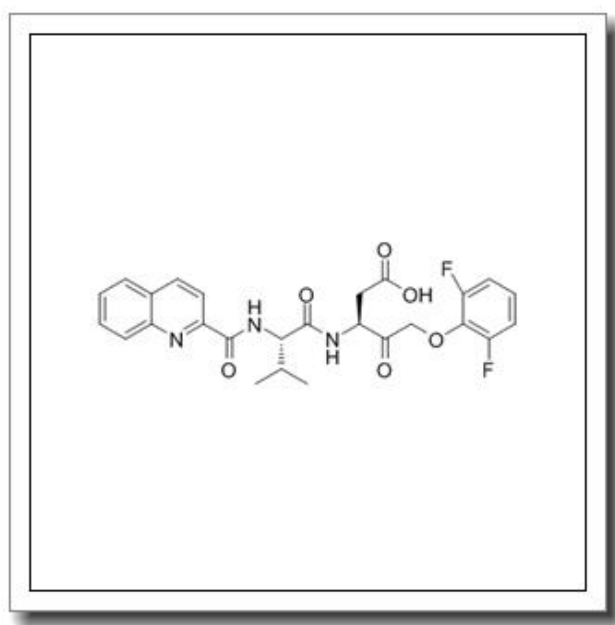


(3S)-5-(2,6-二氟苯氧基)-3-[[[(2S)-3-甲基-1-氧代-2-[(2-喹啉甲酰基)氨基]丁基]氨基]-4-氧代-戊酸

(3S)-5-(2,6-difluorophenoxy)-3-[[[(2S)-3-methyl-2-(quinoline-2-carboxylamino)butanoyl]amino]-4-oxopentanoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(3S)-5-(2,6-difluorophenoxy)-3-[[[(2S)-3-methyl-2-(quinoline-2-carboxylamino)butanoyl]amino]-4-oxopentanoic acid
中文名称	(3S)-5-(2,6-二氟苯氧基)-3-[[[(2S)-3-甲基-1-氧代-2-[(2-喹啉甲酰基)氨基]丁基]氨基]-4-氧代-戊酸
CAS 号	1135695-98-5
分子式	C ₂₆ H ₂₅ F ₂ N ₃ O ₆
分子量	513.49

纯度	$\geq 96\%$
----	-------------

产品说明

(3S)-5-(2,6-二氟苯氧基)-3-[[(2S)-3-甲基-2-(喹啉-2-甲酰胺基)丁酰基]氨基]-4-氧代戊酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为高纯度有机化合物，化学名称 (3S)-5-(2,6-二氟苯氧基)-3-[[(2S)-3-甲基-2-(喹啉-2-甲酰胺基)丁酰基]氨基]-4-氧代戊酸，CAS 号 1135695-98-5，分子式 C₂₆H₂₅F₂N₃O₆，分子量 513.49。其结构包含喹啉甲酰胺基团、二氟苯氧基及羧酸官能团，具有明确的手性中心 (3S 和 2S 构型)。外观通常为白色至类白色结晶性粉末，纯度 ≥96%，需通过 HPLC 或 LC-MS 验证。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物通过喹啉甲酰胺基团和二氟苯氧基的协同作用，表现出靶向蛋白结合能力，可能干预特定信号通路（如激酶抑制或受体调节）。其手性结构对生物活性至关重要，S 构型可优化与靶点的立体选择性相互作用。在药物研发中，此类结构常用于先导化合物优化，以增强代谢稳定性和细胞渗透性。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域，尤其是小分子抑制剂的设计与合成。具体用途包括：

- 1) 作为激酶抑制剂候选分子，用于肿瘤或炎症性疾病研究；
- 2) 用于结构-活性关系 (SAR) 研究，通过修饰羧酸或苯氧基团优化药效；
- 3) 在同位素标记后，可作为代谢追踪探针。实验建议浓度范围为 0.1-10 μM，需根据细胞模型预实验确定。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃、避光、干燥环境中，开封后需充惰性气体保护。溶解建议使用 DMSO（纯度 ≥99.9%），配制成 10 mM 母液后分装保存，避免反复冻融。操作时需佩戴防护手套及护目镜，确保通风良好。

5. 质量控制与安全信息

批次质检包括 HPLC 纯度 (≥96%)、水分 (Karl Fischer 法 <0.5%) 及残留溶剂

(符合 ICH Q3C 标准)。安全数据表明, 该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性 (GHS 分类: Warning), 误接触需立即用清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物处置应遵循当地危险化学品法规。

(注: 本说明基于现有研究数据, 实际应用需结合具体实验验证。)