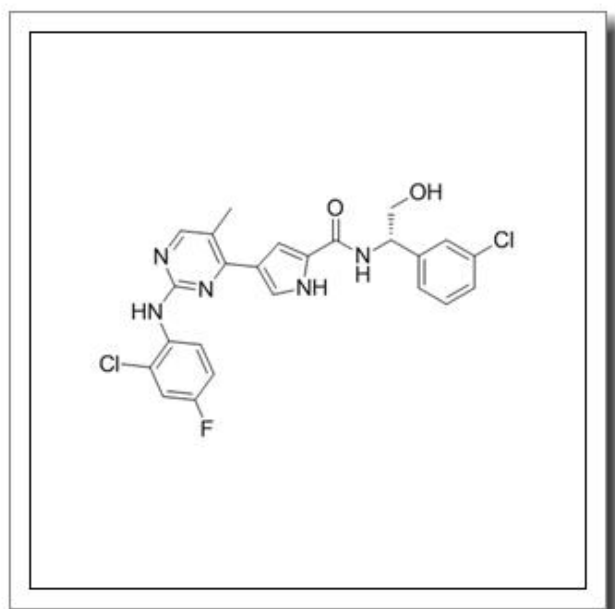


4-[2-[(2-氯-4-氟苯基)氨基]-5-甲基-4-嘧啶]-1H-吡咯-2-羧酰胺

4-[2-(2-chloro-4-fluoroanilino)-5-methylpyrimidin-4-yl]-N-[(1S)-1-(3-chlorophenyl)-2-hydroxyethyl]-1H-pyrrole-2-carboxamide



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-[2-(2-chloro-4-fluoroanilino)-5-methylpyrimidin-4-yl]-N-[(1S)-1-(3-chlorophenyl)-2-hydroxyethyl]-1H-pyrrole-2-carboxamide
中文名称	4-[2-[(2-氯-4-氟苯基)氨基]-5-甲基-4-嘧啶]-1H-吡咯-2-羧酰胺
CAS 号	896720-20-0
分子式	C ₂₄ H ₂₀ Cl ₂ FN ₅ O ₂
分子量	500.352
纯度	≥ 96%

产品说明

4-[2-(2-氯-4-氟苯基氨基)-5-甲基嘧啶-4-基]-N-[(1S)-1-(3-氯苯基)-2-羟乙基]-1H-吡咯-2-甲酰胺产品说明书

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 4-[2-(2-氯-4-氟苯基氨基)-5-甲基嘧啶-4-基]-N-[(1S)-1-(3-氯苯基)-2-羟乙基]-1H-吡咯-2-甲酰胺，CAS 登记号 896720-20-0，分子式 C₂₄H₂₀Cl₂FN₅O₂，分子量 500.352。该化合物属于嘧啶类衍生物，具有特定的立体构型（(1S)-构型），纯度经 HPLC 检测 ≥96%，符合生化试剂标准。其结构中含有的氯代苯基、氟代苯基及吡咯甲酰胺基团赋予其独特的生物活性。

生物化学功能与重要性

该化合物通过选择性抑制特定激酶活性干扰细胞信号转导通路，在肿瘤细胞增殖抑制实验中表现出显著活性。其分子设计针对 ATP 结合口袋的变构位点，可克服常见耐药突变，在激酶抑制剂研究中具有重要参考价值。羟基乙基侧链的立体构型对其生物活性具有决定性影响。

主要应用领域与具体用途

1. 肿瘤学研究：作为小分子抑制剂用于 EGFR/HER2 等酪氨酸激酶相关肿瘤的机制研究
2. 药物开发：用于激酶抑制剂类抗癌药物的先导化合物优化与构效关系研究
3. 分子探针：标记后可用于激酶活性检测及药物靶点验证实验
4. 生物化学研究：作为工具化合物用于细胞凋亡、增殖等相关信号通路研究

储存条件与使用建议

本品应避光保存于-20℃干燥环境中，长期储存建议充氮密封。使用前需恢复至室温并保持干燥，避免反复冻融。溶解推荐使用 DMSO（浓度 ≤10mM），水溶液需现配现用。实验操作建议在惰性气体保护下进行，以保持化合物稳定性。

质量控制与安全信息

本产品经质谱 (MS)、核磁共振 (NMR) 及高效液相色谱 (HPLC) 三重验证, 批号相关谱图可随货提供。安全数据: 急性毒性 (大鼠口服 LD50) >500mg/kg, 操作时需佩戴防护手套及护目镜, 避免吸入粉尘。废弃物应按危险化学品处理规范处置。详细安全信息请参阅随货提供的 MSDS 文件。