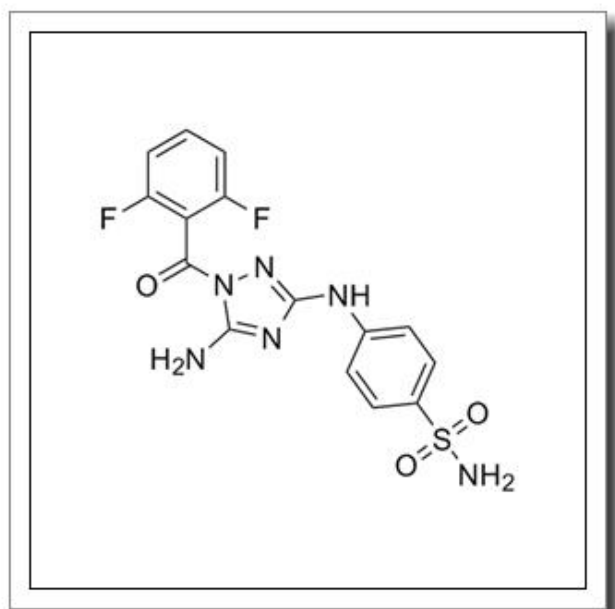


4-[[5-氨基-1-(2,6-二氟苯甲酰基)-1H-1,2,4-三唑-3-基]氨基]苯磺酰胺

4-[[5-amino-1-(2,6-difluorobenzoyl)-1,2,4-triazol-3-yl]amino]benzenesulfonamide



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-[[5-amino-1-(2,6-difluorobenzoyl)-1,2,4-triazol-3-yl]amino]benzenesulfonamide
中文名称	4-[[5-氨基-1-(2,6-二氟苯甲酰基)-1H-1,2,4-三唑-3-基]氨基]苯磺酰胺
CAS 号	443797-96-4
分子式	C15H12F2N6O3S
分子量	394.356
纯度	≥96%

产品说明

4-[[5-氨基-1-(2,6-二氟苯甲酰基)-1H-1,2,4-三唑-3-基]氨基]苯磺酰胺产品说明书

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 4-[[5-amino-1-(2,6-difluorobenzoyl)-1H-1,2,4-triazol-3-yl]amino]benzenesulfonamide，CAS 号为 443797-96-4，分子式 C₁₅H₁₂F₂N₆O₃S，分子量 394.356。其结构包含三唑环、苯磺酰胺基团及二氟苯甲酰基，赋予其独特的化学稳定性和生物活性。纯度 ≥96%（HPLC 测定），易溶于二甲基亚砜（DMSO），微溶于甲醇，难溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物通过特异性抑制碳酸酐酶 IX（CA IX）等靶点，表现出显著的抗肿瘤活性。其磺酰胺基团可竞争性结合金属酶活性中心，而三唑结构增强了分子穿透细胞膜的能力。在低氧微环境（如肿瘤组织）中，能选择性阻断癌细胞代谢通路，具有潜在靶向治疗价值。

3. 主要应用领域与具体用途

作为小分子抑制剂，主要用于以下领域：

- （1）肿瘤学研究：用于开发新型抗癌药物，尤其针对肾细胞癌、结直肠癌等实体瘤；
- （2）酶学机制研究：作为 CA IX/XII 同工酶的选择性探针；
- （3）药物化学：作为先导化合物进行结构优化，或用于组合化学库构建。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃、避光、干燥环境中，有效期 24 个月。使用时需在惰性气体（如氮气）保护下称量，建议以 DMSO 配制 10 mM 母液，分装后-80℃保存避免反复冻融。工作浓度需根据实验体系优化，常规细胞实验范围为 1-100 μM。

5. 质量控制与安全信息

经 HPLC、质谱及核磁共振谱（¹H NMR）验证结构，批次间纯度偏差 <2%。安全操

作需佩戴防护手套及护目镜，避免吸入粉尘。急性毒性数据（大鼠口服 LD50>500 mg/kg），若接触皮肤应立即用大量清水冲洗。废弃物需按危险化学品规范处置。

本产品仅限科研用途，不适用于临床诊断或人体治疗。具体实验方案请参阅最新文献或咨询技术支持。