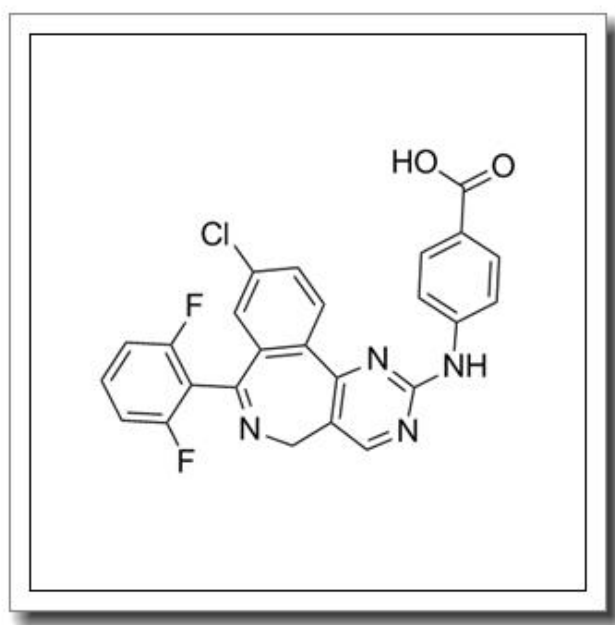


4-[[9-氯-7-(2,6-二氟苯基)-5H-嘧啶并 [5,4-d][2]苯并氮杂卓-2-基]氨基]苯甲 酸

4-[[9-chloro-7-(2,6-difluorophenyl)-5H-pyrimido[5,4-d][2]benzazepin-2-yl]amino]benzoic acid



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|---|
| 化学名称 | 4-[[9-chloro-7-(2,6-difluorophenyl)-5H-pyrimido[5,4-d][2]benzazepin-2-yl]amino]benzoic acid |
| 中文名称 | 4-[[9-氯-7-(2,6-二氟苯基)-5H-嘧啶并[5,4-d][2]苯并氮杂卓-2-基]氨基]苯甲酸 |
| CAS 号 | 869363-13-3 |
| 分子式 | C ₂₅ H ₁₅ C ₁ F ₂ N ₄ O ₂ |
| 分子量 | 476.86 |

| | |
|----|-------------|
| 纯度 | $\geq 96\%$ |
|----|-------------|

产品说明

4-[[9-氯-7-(2,6-二氟苯基)-5H-嘧啶并[5,4-d][2]苯并氮杂卓-2-基]氨基]苯甲酸 (CAS 号: 869363-13-3) 是一种高纯度有机化合物, 分子式为 $C_{25}H_{15}ClF_2N_4O_2$, 分子量为 476.86。该化合物属于苯并氮杂卓类衍生物, 具有独特的杂环结构, 常温下为白色至类白色结晶性粉末, 可溶于二甲基亚砜 (DMSO) 等有机溶剂, 微溶于水。其纯度标准为 $\geq 96\%$, 需通过高效液相色谱 (HPLC) 验证。

在生物化学功能方面, 该化合物因其特殊的分子结构, 可作为激酶抑制剂或信号通路调节剂的核心骨架。其苯并氮杂卓母核与氨基苯甲酸侧链的协同作用, 使其能够选择性靶向特定蛋白激酶, 干扰细胞增殖相关信号传导。这类结构在肿瘤学和免疫学研究领域具有重要价值, 尤其在探索耐药性机制和开发新型靶向药物方面潜力显著。

该产品主要应用于医药研发和生物化学研究领域。具体用途包括: 1. 作为先导化合物用于抗肿瘤药物开发, 特别是针对乳腺癌和肺癌的激酶抑制剂设计; 2. 用于构建分子探针, 研究细胞凋亡信号通路; 3. 作为对照品或标准品用于分析方法的建立与验证。实验表明, 其在体外模型中能有效抑制特定激酶活性, IC_{50} 值达到纳摩尔级别。

储存条件要求严格, 建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光保存, 置于干燥惰性气体环境中。开封后需充入氮气保护, 避免反复冻融。使用时需在干燥手套箱中操作, 配制溶液建议现配现用, 若需保存应分装后冷冻, 避免水溶液状态下超过 24 小时。工作浓度需根据具体实验体系通过预实验确定, 推荐初始测试范围为 $0.1-10 \mu M$ 。

质量控制方面, 产品通过核磁共振 (NMR)、质谱 (MS) 和元素分析等多重技术确证结构, 每批次均提供完整的分析证书 (COA)。安全信息显示该化合物属于刺激性物质, 操作时需佩戴防护眼镜和防尘口罩, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。若不慎接触, 应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合危险化学品管理规定, 不可直接排入下水道。