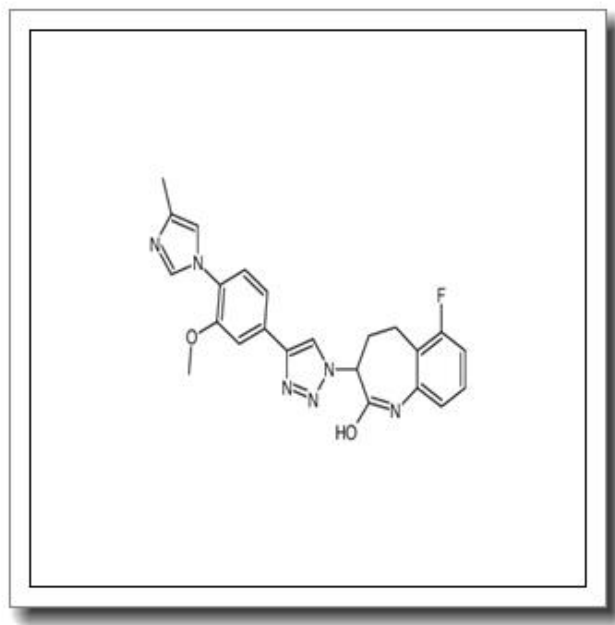


6-Fluoro-3-{4-[3-methoxy-4-(4-methyl-1H-imidazol-1-yl)phenyl]-1H-1,2,3-triazol-1-yl}-1,3,4,5-tetrahydro-2H-1-benzazepin-2-one

6-Fluoro-3-{4-[3-methoxy-4-(4-methyl-1H-imidazol-1-yl)phenyl]-1H-1,2,3-triazol-1-yl}-1,3,4,5-tetrahydro-2H-1-benzazepin-2-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	6-Fluoro-3-{4-[3-methoxy-4-(4-methyl-1H-imidazol-1-yl)phenyl]-1H-1,2,3-triazol-1-yl}-1,3,4,5-tetrahydro-2H-1-benzazepin-2-one
中文名称	6-Fluoro-3-{4-[3-methoxy-4-(4-methyl-1H-imidazol-1-yl)phenyl]-1H-1,2,3-triazol-1-yl}-1,3,4,5-tetrahydro-2H-1-benzazepin-2-one
CAS 号	1093978-67-6

分子式	C ₂₃ H ₂₁ FN ₆ O ₂
分子量	432.45
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为 6-Fluoro-3-{4-[3-methoxy-4-(4-methyl-1H-imidazol-1-yl)phenyl]-1H-1,2,3-triazol-1-yl}-1,3,4,5-tetrahydro-2H-1-benzazepin-2-one, CAS 号 1093978-67-6, 分子式 C₂₃H₂₁FN₆O₂, 分子量 432.45。该化合物是一种含氟杂环衍生物, 结构中含有苯并氮杂草骨架、三唑基团及甲氧基取代的咪唑苯基, 具有显著的分子多样性和空间位阻效应。其纯度 ≥96%, 常温下为白色至类白色固体, 需避光保存。

2. 生物化学功能与重要性

该分子通过三唑基团与苯并氮杂草的协同作用, 可作为靶向蛋白激酶或 G 蛋白偶联受体的调节剂。其氟原子和咪唑基团增强了与生物大分子的相互作用力, 在信号转导或酶抑制研究中表现出高选择性。此类结构类似物常被用于探索神经退行性疾病或肿瘤相关通路机制。

3. 主要应用领域与具体用途

本品适用于药物研发领域, 尤其作为先导化合物用于优化活性分子结构。具体用途包括: 1) 体外激酶抑制实验的阳性对照; 2) 细胞水平信号通路研究的工具化合物; 3) 用于合成更复杂靶向分子的中间体。在抗肿瘤或抗炎药物筛选中具有潜在应用价值。

4. 储存条件与使用建议

建议长期储存于-20℃惰性气体环境中, 短期使用可置于 2-8℃干燥避光处。开封后需充氩气密封保存。使用时需在干燥环境下操作, 避免反复冻融。溶解推荐使用 DMSO (浓度 ≤10mM), 水溶液需现配现用。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 验证纯度 ≥96%, 批次间差异 <2%。MS/NMR 数据可提供溯源报告。安全注意事项: 1) 穿戴防护手套及护目镜; 2) 避免吸入粉尘或接触皮肤; 3) 如遇

泄漏需用惰性吸附材料处理。毒性数据尚未完全明确，建议按潜在有害化学品规范操作，废弃物处置需符合当地环保法规。

注：以上信息基于现有研究数据，实际应用前请查阅最新文献并开展预实验验证。