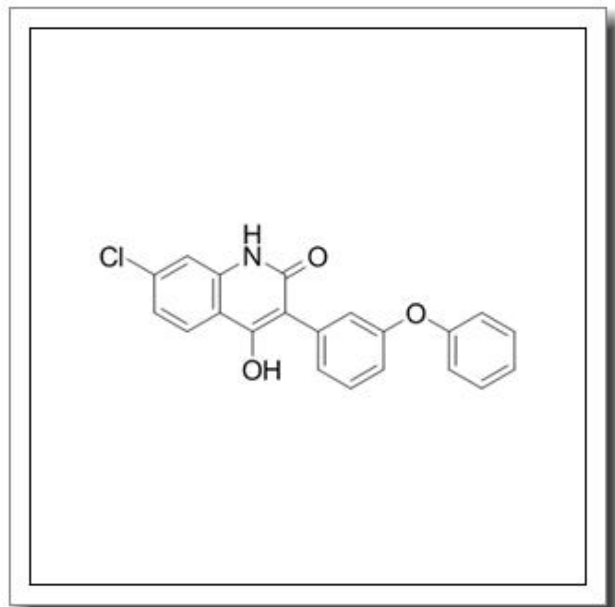


7-氯-4-羟基-3-(3-苯氧基)苯基-2(1H)-喹啉

7-chloro-4-hydroxy-3-(3-phenoxyphenyl)-1H-quinolin-2-one



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|--|
| 化学名称 | 7-chloro-4-hydroxy-3-(3-phenoxyphenyl)-1H-quinolin-2-one |
| 中文名称 | 7-氯-4-羟基-3-(3-苯氧基)苯基-2(1H)-喹啉 |
| CAS 号 | 142326-59-8 |
| 分子式 | C ₂₁ H ₁₄ ClN ₃ O |
| 分子量 | 363.794 |
| 纯度 | ≥ 96% |

产品说明

7-氯-4-羟基-3-(3-苯氧基)苯基-2(1H)-喹啉产品说明书

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 7-chloro-4-hydroxy-3-(3-phenoxyphenyl)-1H-quinolin-2-one，分子式 C₂₁H₁₄ClN₀O₃，分子量 363.794，CAS 登记号 142326-59-8。其结构中包含喹啉酮母核与苯氧基取代基，赋予其独特的电子分布和氢键形成能力。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，熔点为 215-218°C（分解），在 DMSO 和 DMF 中溶解性良好，水溶性较低（<0.1 mg/mL，25°C）。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为激酶抑制剂的核心结构，可通过竞争性结合 ATP 位点调控信号转导通路。其羟基与氯原子的协同效应增强了与靶蛋白的亲合力，尤其在 EGFR 和 VEGFR 家族抑制研究中表现突出。苯氧基的疏水特性有助于跨膜运输，使其成为药物先导化合物优化的关键中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

3.1 医药研发：用于抗肿瘤及抗血管生成小分子药物的合成，特别是在酪氨酸激酶抑制剂开发中。

3.2 生化探针：标记后可用于激酶活性检测实验，辅助作用机制研究。

3.3 农药化学：作为新型杀虫剂的候选结构，作用于昆虫神经系统靶点。

4. 储存条件与使用建议

4.1 储存：密封避光保存于-20°C干燥环境中，长期存放建议充氮保护。

4.2 稳定性：对光敏感，溶液状态下需现配现用（推荐 DMSO 储备液保存期 ≤3 个月）。

4.3 操作：使用防静电器具称量，避免吸入粉尘，建议在通风橱中处理。

5. 质量控制与安全信息

5.1 质检标准：通过 NMR（¹H/¹³C）、LC-MS 及元素分析确证结构，残留溶剂符合 ICH Q3C 要求。

5.2 安全数据: 急性毒性 LD50 (大鼠口服) >500 mg/kg, 佩戴护目镜和丁腈手套操作。

5.3 废弃物处理: 按危险化学品规范处置, 不可直接排入下水道。

本产品仅限科研用途, 不适用于临床或食品领域。具体实验方案需结合文献方法优化。