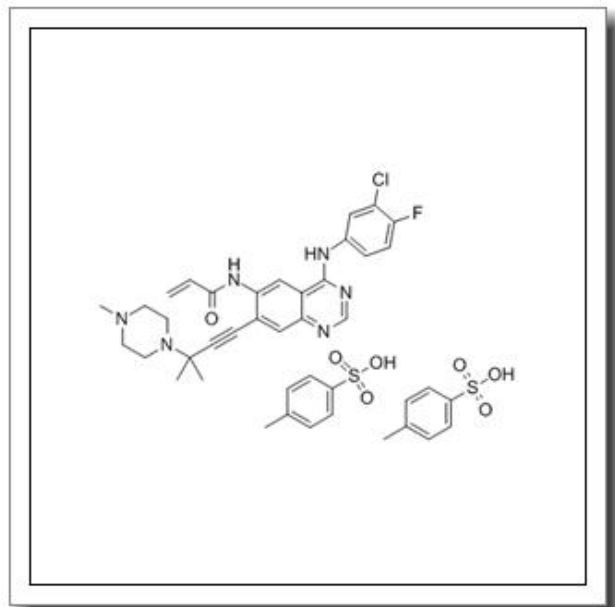


AV-412

N-[4-(3-chloro-4-fluoroanilino)-7-[3-methyl-3-(4-methylpiperazin-1-yl)but-1-ynyl]quinazolin-6-yl]prop-2-enamide, 4-methylbenzenesulfonic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>N</i> -[4-(3-chloro-4-fluoroanilino)-7-[3-methyl-3-(4-methylpiperazin-1-yl)but-1-ynyl]quinazolin-6-yl]prop-2-enamide, 4-methylbenzenesulfonic acid
中文名称	AV-412
CAS 号	451493-31-5
分子式	C ₄₁ H ₄₄ ClFN ₆ O ₇ S ₂
分子量	851.405
纯度	≥ 96%

产品说明

AV-412 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

AV-412 (化学名称: N-[4-(3-chloro-4-fluoroanilino)-7-[3-methyl-3-(4-methylpiperazin-1-yl)but-1-ynyl]quinazolin-6-yl]prop-2-enamide, 4-methylbenzenesulfonic acid) 是一种高纯度喹唑啉类衍生物, CAS 号为 451493-31-5, 分子式 C₄₁H₄₄ClFN₆O₇S₂, 分子量 851.405。本品以对甲苯磺酸盐形式存在, 外观为白色至类白色结晶粉末, 纯度 ≥96%, 符合 HPLC 检测标准。其结构中的氯氟苯胺基团和甲基哌嗪基团赋予其独特的生物活性与溶解特性。

2. 生物化学功能与重要性

AV-412 作为靶向小分子抑制剂, 可通过选择性结合特定激酶结构域 (如 EGFR 家族成员), 干扰异常信号通路传导, 抑制肿瘤细胞增殖。其喹唑啉核心结构与丙烯酰胺侧链的协同作用, 增强了与 ATP 结合位点的亲和力, 展现出显著的抗肿瘤活性。该化合物在耐药性研究中表现突出, 尤其对 T790M 突变型 EGFR 具有高效抑制作用。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于肿瘤学基础研究与药物开发领域, 具体包括:

- 体外激酶抑制实验, 用于筛选和验证新型抗肿瘤化合物;
- 构建动物模型, 评估其对非小细胞肺癌等实体瘤的疗效;
- 作为参比标准品, 用于质谱分析或 ELISA 检测方法的建立;
- 联合用药研究, 探索其与化疗/免疫疗法的协同效应。

4. 储存条件与使用建议

储存条件: 需避光密封保存于 -20℃ 干燥环境中, 长期存放建议充氮保护。开封后需分装使用, 避免反复冻融。

使用建议: 建议以 DMSO 配制母液 (浓度 10-20 mM), 使用时以缓冲液稀释至工作

浓度。需注意其水溶性有限，建议超声辅助溶解。体外实验推荐浓度范围为 0.1-10 μM ，具体需根据细胞系敏感性优化。

5. 质量控制与安全信息

质量控制：通过 HPLC、NMR 及质谱进行批次验证，确保化学结构与纯度符合标准。残留溶剂（如 DCM、甲醇）含量均低于 ICH 限值。

安全信息：本品为实验用化学品，非药用规格。操作时需穿戴防护装备，避免吸入或皮肤接触。MSDS 数据显示其可能具有生殖毒性（GHS 分类 H361），废弃物应作为危险化学品处置。急救措施：如接触眼睛，立即用大量清水冲洗并就医。