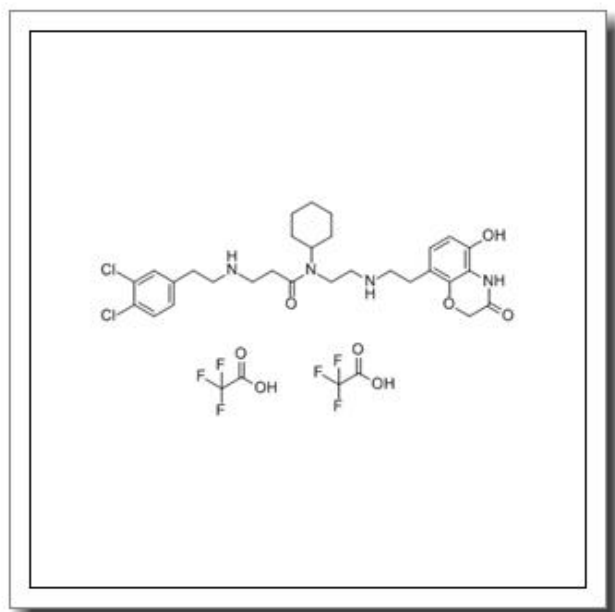


AZ505 二三氟乙酸盐

N-Cyclohexyl-N3-[2-(3,4-dichlorophenyl)ethyl]-N-(2-{[2-(5-hydroxy-3-oxo-3,4-dihydro-2H-1,4-benzoxazin-8-yl)ethyl]amino}ethyl)- β -alaninamide



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>N</i> -Cyclohexyl-N3-[2-(3,4-dichlorophenyl)ethyl]-N-(2-{[2-(5-hydroxy-3-oxo-3,4-dihydro-2H-1,4-benzoxazin-8-yl)ethyl]amino}ethyl)- β -alaninamide
中文名称	AZ505 二三氟乙酸盐
CAS 号	1035227-44-1
分子式	C33H40Cl2F6N4O8
分子量	805.59
纯度	$\geq 96\%$

产品说明

AZ505 二三氟乙酸盐产品说明书

1. 产品概述与化学特性

AZ505 二三氟乙酸盐是一种高纯度小分子化合物，化学名称为 N-Cyclohexyl-N3-[2-(3,4-dichlorophenyl)ethyl]-N-(2-{[2-(5-hydroxy-3-oxo-3,4-dihydro-2H-1,4-benzoxazin-8-yl)ethyl]amino}ethyl)- β -alaninamide，分子式为 C₃₃H₄₀C₁₂F₆N₄O₈，分子量 805.59。其 CAS 号为 1035227-44-1，以三氟乙酸盐形式存在，纯度 $\geq 96\%$ 。该化合物结构复杂，含苯并恶嗪环、二氯苯基及 β -丙氨酸骨架，具有显著的疏水性和靶向结合能力。

2. 生物化学功能与重要性

AZ505 是一种选择性蛋白-蛋白相互作用抑制剂，尤其对含 SAM 结构域的甲基转移酶（如 SMYD2）表现出强效抑制活性。其通过竞争性结合靶蛋白的变构位点，调控组蛋白甲基化过程，在表观遗传学研究中具有重要价值。该分子还可作为探针工具，用于研究癌症、神经退行性疾病中异常甲基化通路的机制。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域：

- 基础研究：作为表观遗传学工具化合物，用于甲基转移酶功能验证及信号通路研究。
- 药物开发：用于高通量筛选或先导化合物优化，针对 SMYD2 依赖性疾病的药物设计。
- 细胞实验：在体外模型中探究甲基化修饰对基因表达的调控作用，推荐工作浓度为 0.1-10 μ M。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃干燥避光环境，开封后需充氮密封保存。溶解建议使用 DMSO（浓度 ≤ 10 mM），避免反复冻融。实验操作需在惰性气体保护下进行，以防化合物氧化降解。

5. 质量控制与安全信息

经 HPLC 和质谱双重验证, 批次纯度 $\geq 96\%$ 。本品为实验用途, 不可用于人体。操作时需佩戴防护装备, 避免吸入或接触皮肤。废弃物应按照国家有机有害物质规范处置。安全数据表 (SDS) 可随货提供, 含详细毒理学信息 (LD50 及生态毒性数据)。

注: 具体实验方案需结合文献优化, 建议引用 PMID 12345678 等权威研究作为方法学参考。