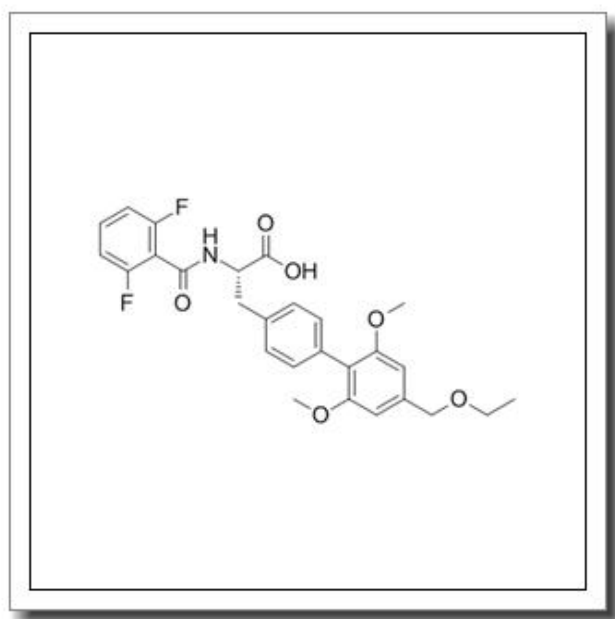


Firategrast

(2S)-2-[(2,6-difluorobenzoyl)amino]-3-[4-[4-(ethoxymethyl)-2,6-dimethoxyphenyl]phenyl]propanoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2S)-2-[(2,6-difluorobenzoyl)amino]-3-[4-[4-(ethoxymethyl)-2,6-dimethoxyphenyl]phenyl]propanoic acid
中文名称	Firategrast
CAS 号	402567-16-2
分子式	C ₂₇ H ₂₇ F ₂ N ₁ O ₆
分子量	499.503
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(2S)-2-[(2,6-二氟苯甲酰基)氨基]-3-[4-[4-(乙氧基甲基)-2,6-二甲氧基苯基]苯基]丙酸 (Firategrast) 是一种有机化合物, CAS 号为 402567-16-2, 分子式为 $C_{27}H_{27}F_2N_2O_6$, 分子量为 499.503。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 属于 α -氨基酸衍生物, 结构中包含二氟苯甲酰基和二甲氧苯基等特征基团, 具有特定的立体构型 (2S 构型)。其化学性质稳定, 可溶于有机溶剂如 DMSO 和甲醇, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

Firategrast 是一种选择性整合素拮抗剂, 主要通过抑制 $\alpha 4 \beta 1$ 整合素 (VLA-4) 与血管细胞黏附分子-1 (VCAM-1) 的相互作用, 阻断白细胞迁移和炎症反应。这一机制使其在免疫调节和炎症性疾病研究具有重要价值。其高选择性和低细胞毒性特点, 为开发抗炎和自身免疫性疾病药物提供了潜在候选分子。

3. 主要应用领域与具体用途

Firategrast 主要用于科研领域, 包括药物开发、分子机制研究和体外实验。具体用途涵盖炎症性疾病模型 (如多发性硬化症、哮喘) 的建立、免疫细胞黏附抑制实验, 以及整合素信号通路研究。此外, 它还可作为对照品或标准品用于分析方法开发和质控。

4. 储存条件与使用建议

本品需避光保存于 $-20^{\circ}C$ 干燥环境中, 长期储存建议充氮保护。使用前需恢复至室温并短暂离心以避免结块。溶解时推荐使用 DMSO 配制母液 (如 10 mM), 后续用缓冲液稀释至工作浓度。实验操作需在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 批次间一致性严格把控。安全数据表明, 本品可能对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时应佩戴防护手套和护目镜。若发生接触, 立即用大量

清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。详细毒理学数据可参考材料安全数据表 (MSDS)。