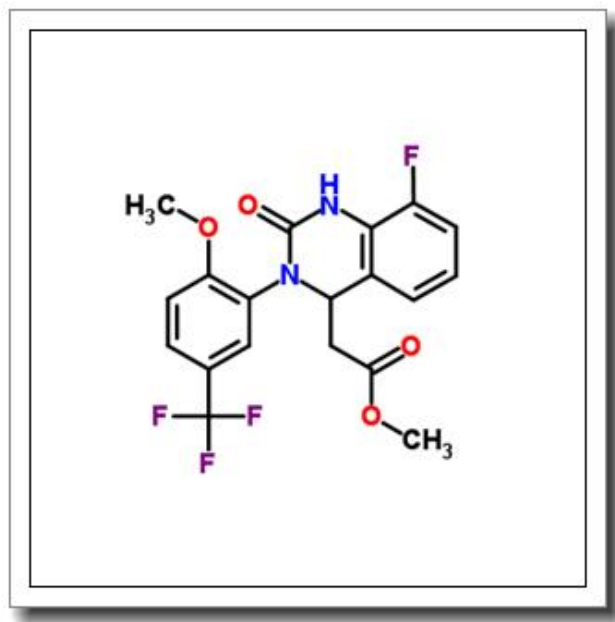


Methyl {8-fluoro-3-[2-methoxy-5-(trifluoromethyl)phenyl]-2-oxo-1,2,3,4-tetrahydro-4-quinazolinyl}acetate

Methyl {8-fluoro-3-[2-methoxy-5-(trifluoromethyl)phenyl]-2-oxo-1,2,3,4-tetrahydro-4-quinazolinyl}acetate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl {8-fluoro-3-[2-methoxy-5-(trifluoromethyl)phenyl]-2-oxo-1,2,3,4-tetrahydro-4-quinazolinyl}acetate
中文名称	Methyl {8-fluoro-3-[2-methoxy-5-(trifluoromethyl)phenyl]-2-oxo-1,2,3,4-tetrahydro-4-quinazolinyl}acetate
CAS 号	917389-21-0
分子式	C ₁₉ H ₁₆ F ₄ N ₂ O ₄
分子量	412.335

纯度	$\geq 96\%$
----	-------------

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 Methyl {8-fluoro-3-[2-methoxy-5-(trifluoromethyl)phenyl]-2-oxo-1,2,3,4-tetrahydro-4-quinazolinyl} acetate, 中文名称为甲基{8-氟-3-[2-甲氧基-5-(三氟甲基)苯基]-2-氧代-1,2,3,4-四氢-4-喹唑啉基}乙酸酯, CAS 号为 917389-21-0。其分子式为 C₁₉H₁₆F₄N₂O₄, 分子量为 412.335, 纯度 ≥96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 具有特定的喹唑啉骨架结构, 含氟取代基和酯基官能团, 表现出良好的化学稳定性和溶解性 (溶于常见有机溶剂如 DMSO、甲醇等)。

2. 生物化学功能与重要性

本品作为一种喹唑啉类衍生物, 其结构中的氟原子和三氟甲基可显著增强分子的脂溶性和生物膜穿透能力, 而酯基则可能作为前药基团参与代谢活化。此类结构在药物化学中常作为激酶抑制剂或受体调节剂的核心骨架, 具有潜在的抗肿瘤、抗炎或中枢神经系统活性, 是药物研发领域的重要中间体或先导化合物。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于医药研发领域, 具体包括:

- 作为小分子靶向药物的关键中间体, 用于合成抗肿瘤或抗炎候选化合物;
- 在激酶抑制剂筛选中作为结构修饰的模板, 探索构效关系;
- 用于体外生化实验, 研究其与特定蛋白靶点的相互作用机制。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光干燥储存, 长期保存需充惰性气体保护。使用时需在干燥环境下操作, 避免反复冻融。溶解前建议短暂超声处理以提高溶解度, 配制溶液需现配现用。实验操作应在通风橱中进行, 并佩戴防护手套及护目镜。

5. 质量控制与安全信息

本品通过 HPLC 检测确认纯度 ≥96%, 并提供质谱 (MS) 和核磁 (NMR) 数据以验证结构。安全信息提示: 该化合物可能对眼睛、皮肤及呼吸系统有刺激性, 操作时应

避免直接接触。若不慎吸入或接触，应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。

（注：以上说明基于现有化学数据撰写，具体生物活性需以实验验证为准。）