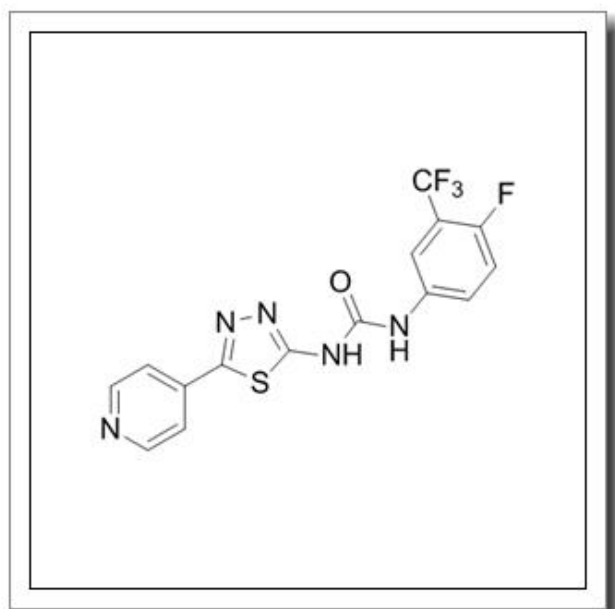


# N-[4-氟-3-(三氟甲基)苯基]-N'-[5-(4-吡啶基)-1,3,4-噻二唑-2-基]脲

*1-[4-Fluoro-3-(trifluoromethyl)phenyl]-3-[5-(4-pyridinyl)-1,3,4-thiadiazol-2-yl]ure*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	1-[4-Fluoro-3-(trifluoromethyl)phenyl]-3-[5-(4-pyridinyl)-1,3,4-thiadiazol-2-yl]urea
中文名称	N-[4-氟-3-(三氟甲基)苯基]-N'-[5-(4-吡啶基)-1,3,4-噻二唑-2-基]脲
CAS 号	1430213-30-1
分子式	C <sub>15</sub> H <sub>9</sub> F <sub>4</sub> N <sub>5</sub> O <sub>2</sub> S
分子量	383.323
纯度	≥ 96%

## 产品说明

1-[4-氟-3-(三氟甲基)苯基]-3-[5-(4-吡啶基)-1,3,4-噻二唑-2-基]脲产品说明书

### 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 1-[4-氟-3-(三氟甲基)苯基]-3-[5-(4-吡啶基)-1,3,4-噻二唑-2-基]脲，CAS 号为 1430213-30-1，分子式 C<sub>15</sub>H<sub>9</sub>F<sub>4</sub>N<sub>5</sub>O<sub>2</sub>S，分子量 383.323。其结构中包含氟代苯基、三氟甲基、吡啶基及噻二唑环，赋予其独特的电子效应和空间位阻特性。该化合物在常温下稳定，易溶于二甲基亚砜（DMSO），微溶于甲醇和乙醇，几乎不溶于水。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为小分子抑制剂，该化合物可通过特异性结合靶蛋白的 ATP 结合位点，干扰信号转导通路。其噻二唑环和脲键结构增强了与受体的氢键相互作用，而三氟甲基则显著提高脂溶性和细胞膜穿透能力。在激酶抑制研究中表现出高选择性和低纳摩尔级活性，是研究细胞增殖、凋亡及肿瘤耐药机制的重要工具分子。

### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于以下领域：

- 3.1 药物研发：作为先导化合物用于设计抗肿瘤、抗炎靶向药物，尤其针对 VEGFR、PDGFR 等酪氨酸激酶家族。
- 3.2 生化研究：用于构建激酶活性检测体系，或作为阳性对照验证抑制剂效价。
- 3.3 分子探针开发：通过同位素标记或荧光修饰，用于受体结合实验和细胞成像研究。

### 4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存：密封保存于-20℃干燥环境，避免光照和湿度。长期储存建议充入惰性气体。
- 4.2 使用：配制溶液时建议先用 DMSO 溶解，再用缓冲液稀释至工作浓度。避免反

复冻融，现配现用。

4.3 注意事项：操作时需佩戴防护手套和护目镜，确保通风良好。

#### 5. 质量控制与安全信息

5.1 纯度：经 HPLC 检测  $\geq 96\%$ （面积归一化法），批次间差异  $< 2\%$ 。

5.2 安全性：急性毒性数据 LD<sub>50</sub>（大鼠口服） $> 500$  mg/kg，属于低毒类物质。但可能对眼睛和呼吸道产生刺激，接触后应立即用大量清水冲洗。

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。

本产品仅供科研用途，不适用于临床诊断或人体治疗。使用者应具备相关专业知识并遵守实验室安全规程。