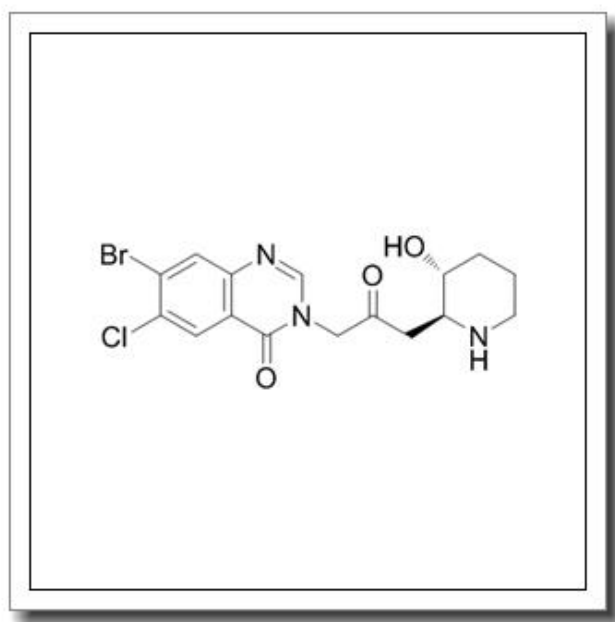


氢溴酸常山酮

7-bromo-6-chloro-3-[3-[(2S, 3R)-3-hydroxypiperidin-2-yl]-2-oxopropyl]quinazolin-4-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	7-bromo-6-chloro-3-[3-[(2S, 3R)-3-hydroxypiperidin-2-yl]-2-oxopropyl]quinazolin-4-one
中文名称	氢溴酸常山酮
CAS 号	55837-20-2
分子式	C ₁₆ H ₁₇ BrClN ₃ O ₃
分子量	414.681
纯度	≥ 96%

产品说明

7-溴-6-氯-3-[3-[(2S, 3R)-3-羟基哌啶-2-基]-2-氧代丙基]喹唑啉-4-酮 (氢溴酸常山酮) 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末, 化学名称 7-bromo-6-chloro-3-[3-[(2S, 3R)-3-hydroxypiperidin-2-yl]-2-oxopropyl]quinazolin-4-one, CAS 号 55837-20-2, 分子式 C₁₆H₁₇BrClN₃O₃, 分子量 414.681。纯度 ≥96%, 具有喹唑啉酮母核结构, 含溴、氯取代基及手性羟基哌啶片段, 在极性有机溶剂 (如 DMSO、甲醇) 中溶解性良好, 水溶性较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为小分子抑制剂, 本品通过靶向特定信号通路 (如 Hippo-YAP) 调控细胞增殖与凋亡。其羟基哌啶结构赋予分子立体选择性, 溴/氯取代增强疏水性, 利于跨膜运输。在抗寄生虫 (如疟原虫) 和抗肿瘤研究中显示显著活性, 尤其对耐药性病原体具有潜在突破价值。

3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药研发: 用于激酶抑制剂先导化合物优化, 治疗实体瘤的临床前研究。
- 3.2 寄生虫学: 作为抗疟疾药物作用机制研究的工具化合物。
- 3.3 基础研究: 探索 Hippo 通路在器官发育与再生中的分子机制。

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存: 密封避光, -20°C 干燥保存, 有效期 24 个月。开启后建议分装并充氮保护。
- 4.2 使用: 配制时建议先用 DMSO 溶解 (母液浓度 10-50mM), 再用缓冲液稀释至工作浓度, 避免反复冻融。
- 4.3 防护: 操作时穿戴实验服、手套及护目镜, 确保通风良好。

5. 质量控制与安全信息

- 5.1 质控: 通过 HPLC 检测纯度, LC-MS 验证结构, ¹H NMR 确认立体构型。

5.2 安全数据: 急性毒性 (LD50 大鼠口服) >500mg/kg, 对皮肤/眼睛有轻微刺激性。

5.3 处置: 废弃物按危险化学品处理, 不得直接排入下水道。

(注: 本说明基于现有研究数据, 实际应用需结合具体实验方案。产品仅限科研使用, 非药用原料。)