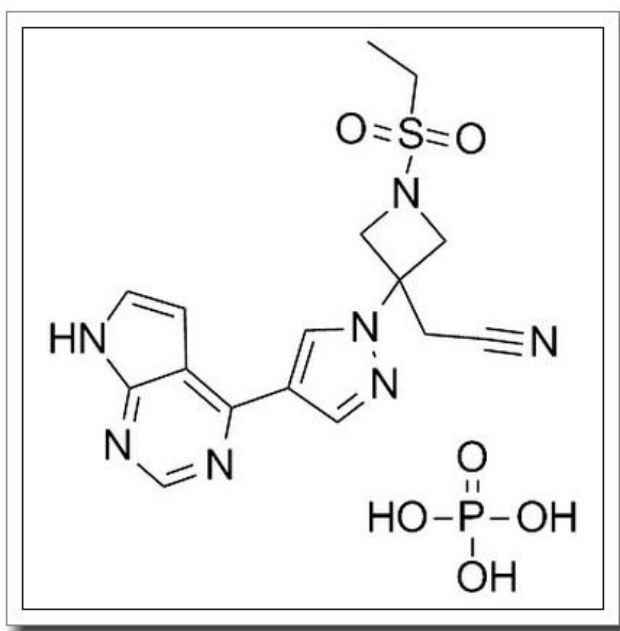


[1-(乙基磺酰基)-3-[4-(7H-吡咯并[2,3-D]咪啉-4-基)-1H-吡唑-1-基]氮杂环丁烷-3-基]乙腈磷酸盐

2-[1-ethylsulfonyl-3-[4-(7H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidin-4-yl)pyrazol-1-yl]azetidin-3-yl]acetonitrile, phosphoric acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-[1-ethylsulfonyl-3-[4-(7H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidin-4-yl)pyrazol-1-yl]azetidin-3-yl]acetonitrile, phosphoric acid
中文名称	[1-(乙基磺酰基)-3-[4-(7H-吡咯并[2,3-D]咪啉-4-基)-1H-吡唑-1-基]氮杂环丁烷-3-基]乙腈磷酸盐
CAS 号	1187595-84-1
分子式	C ₁₆ H ₂₀ N ₇ O ₆ PS
分子量	469.412

纯度	>96%
----	------

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为 2-[1-乙基磺酰基-3-[4-(7H-吡咯并[2,3-d]嘧啶-4-基)吡唑-1-基]氮杂环丁烷-3-基]乙腈磷酸盐, 化学式为 C₁₆H₂₀N₇O₆PS, 分子量 469.412, CAS 号 1187595-84-1。其结构包含吡咯并嘧啶核心与氮杂环丁烷骨架, 通过磺酰基和磷酸盐修饰增强水溶性及生物活性。纯度经 HPLC 验证 ≥96%, 外观为白色至类白色结晶性粉末, 易溶于 DMSO 等有机溶剂, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是一种高选择性激酶抑制剂, 通过靶向 ATP 结合位点调控细胞信号通路。其吡咯并嘧啶结构域可特异性结合特定激酶 (如 JAK 家族), 抑制异常磷酸化过程, 在肿瘤免疫和炎症研究中具有重要价值。磷酸盐修饰进一步优化了其药代动力学特性, 适用于体外和体内模型研究。

3. 主要应用领域与具体用途

作为小分子探针, 广泛应用于以下领域:

- 肿瘤学研究: 用于探索激酶依赖性肿瘤增殖机制
- 药物开发: 作为先导化合物优化激酶抑制剂类药物
- 信号通路分析: 通过 Western blot 或 ELISA 验证下游蛋白表达
- 体外实验: 推荐工作浓度为 0.1-10 μM, 需根据细胞系预实验确定最佳剂量

4. 储存条件与使用建议

长期储存需置于 -20°C 干燥避光环境, 开封后建议分装以避免反复冻融。溶解时优先使用预冷的 DMSO (浓度 ≤10 mM), 后续可用 PBS 或培养基稀释。操作时需佩戴防护装备, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

批次均经 LC-MS 和核磁共振谱验证, 提供 COA 分析证书。急性毒性数据 (大鼠口服 LD₅₀ > 500 mg/kg) 显示其属于低毒化合物, 但仍有潜在刺激性。废弃物处理需符

合危险化学品管理条例，建议通过专业机构降解。实验中出现异常需立即停止使用并咨询毒理学专家。

注：本产品仅限科研用途，不可用于人体或临床诊断。具体实验方案建议参考文献或供应商提供的技术手册。