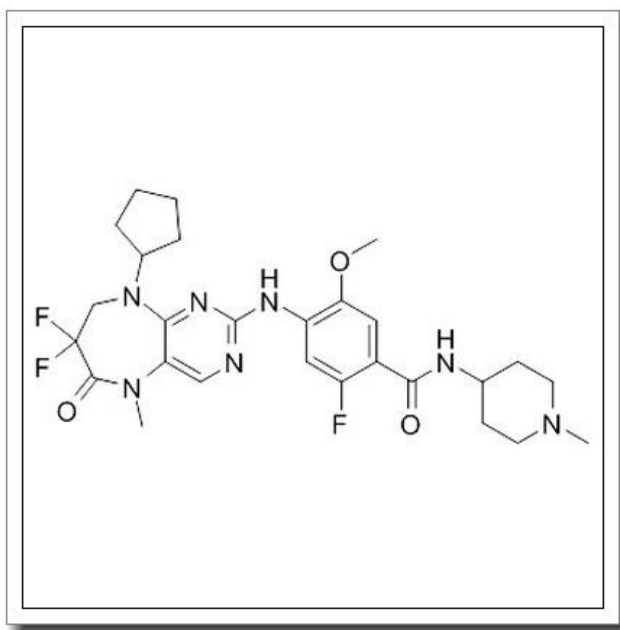


4-[(9-cyclopentyl-7,7-difluoro-5-methyl-6-oxo-8H-pyrimido[4,5-b][1,4]diazepin-2-yl)amino]-2-fluoro-5-methoxy-N-(1-methylpiperidin-4-yl)benzamide

4-[(9-cyclopentyl-7,7-difluoro-5-methyl-6-oxo-8H-pyrimido[4,5-b][1,4]diazepin-2-yl)amino]-2-fluoro-5-methoxy-N-(1-methylpiperidin-4-yl)benzamide



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-[(9-cyclopentyl-7,7-difluoro-5-methyl-6-oxo-8H-pyrimido[4,5-b][1,4]diazepin-2-yl)amino]-2-fluoro-5-methoxy-N-(1-methylpiperidin-4-yl)benzamide
中文名称	4-[(9-cyclopentyl-7,7-difluoro-5-methyl-6-oxo-8H-pyrimido[4,5-b][1,4]diazepin-2-yl)amino]-2-

	fluoro-5-methoxy-N-(1-methylpiperidin-4-yl)benzamide
CAS 号	1137868-52-0
分子式	C ₂₇ H ₃₄ F ₃ N ₇ O ₃
分子量	561. 599
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶粉末，化学名称为 4-[(9-环戊基-7,7-二氟-5-甲基-6-氧代-8H-嘧啶并[4,5-b][1,4]二氮杂草-2-基)氨基]-2-氟-5-甲氧基-N-(1-甲基哌啶-4-基)苯甲酰胺，分子式 C₂₇H₃₄F₃N₇O₃，分子量 561.599。其 CAS 号为 1137868-52-0，纯度经 HPLC 检测确认 ≥96%。该化合物在常温下稳定，微溶于水，易溶于 DMSO、DMF 等有机溶剂，需避光保存以避免光解反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为嘧啶并二氮杂草类衍生物，该分子通过选择性抑制特定激酶活性（如 CDK 或 PI3K 家族成员），在细胞周期调控和信号转导中发挥关键作用。其结构中含有的二氟甲基和甲氧基苯甲酰胺基团可增强靶标结合亲和力，而哌啶环则优化了药物代谢特性，使其成为肿瘤学和免疫学研究中的重要工具化合物。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于以下领域：

- 抗肿瘤药物研发：作为先导化合物用于评估激酶抑制剂的体外活性。
- 分子机制研究：探究细胞凋亡、增殖相关通路的作用机制。
- 临床前研究：动物模型中验证药效学与药代动力学特性。

建议使用浓度需根据实验体系优化，常规体外实验起始浓度为 0.1-10 μM。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃干燥环境中，开封后需充氮密封保存。使用时需佩戴防护手套及护目镜，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。配制溶液建议使用新鲜无水 DMSO，分装后-80℃长期保存，避免反复冻融。

5. 质量控制与安全信息

批次质检报告包含 HPLC 纯度、水分含量及重金属残留数据。该化合物属于危险化

学品（GHS 分类：急性毒性类别 4），操作时应遵守实验室生物安全二级标准。废弃物需按有机卤化物规范处置，紧急接触时立即用大量清水冲洗并就医。

注：本说明仅限科研用途，不适用于诊断或治疗人类疾病。具体实验方案需参考文献或咨询专业技术支持。