

# (S)-N-(3-(3,4-dihydroisoquinolin-2(1H)-yl)-2-hydroxypropyl)-6-(oxetan-3-ylamino)pyrimidine-4-carboxamide

---

产品图片未找到

## 产品基本信息

属性	值
化学名称	(S)-N-(3-(3,4-dihydroisoquinolin-2(1H)-yl)-2-hydroxypropyl)-6-(oxetan-3-ylamino)pyrimidine-4-carboxamide
产品目录号	
CAS 号	1616391-65-1
分子式	C <sub>20</sub> H <sub>25</sub> N <sub>5</sub> O <sub>3</sub>
分子量	383.444
纯度	>96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

本产品为高纯度生化试剂，化学名称为(S)-N-(3-(3,4-二氢异喹啉-2(1H)-基)-2-羟基丙基)-6-(氧杂环丁烷-3-基氨基)嘧啶-4-甲酰胺，CAS 号为 1616391-65-1。其分子式为 C<sub>20</sub>H<sub>25</sub>N<sub>5</sub>O<sub>3</sub>，分子量为 383.444，纯度经高效液相色谱(HPLC)验证大于 96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末，可溶于有机溶剂如 DMSO 或甲醇，但在水中的溶解度较低。其结构包含嘧啶甲酰胺核心与氧杂环丁烷、二氢异喹啉等药效团，具有显著的手性特征（S 构型）。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物是一种小分子抑制剂，通过选择性靶向特定激酶或蛋白质相互作用发挥功能。其氧杂环丁烷氨基嘧啶结构可模拟 ATP 结合位点，而二氢异喹啉基团增强细胞膜穿透性。在信号通路调控中，它能干扰异常磷酸化过程，对肿瘤细胞增殖、炎症反应或神经退行性疾病相关靶点表现出潜在调控作用，是药物开发领域的重要先导化合物。

### 3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发与基础研究领域：

- 作为激酶抑制剂候选分子，用于抗肿瘤或抗炎药物筛选
- 用于构建体外细胞模型，研究相关信号通路机制
- 在结构生物学中作为结晶配体辅助蛋白质结构解析
- 作为荧光标记或探针修饰的化学中间体

### 4. 储存条件与使用建议

建议在-20℃干燥避光条件下长期储存，短期使用可置于 4℃环境。开封前需平衡至室温以避免吸湿。配制溶液时推荐使用无水 DMSO 作为溶剂，工作浓度需通过预实验确定（典型范围为 0.1-10 μM）。本品对光敏感，实验操作建议在避光条件下进行。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱(MS)和核磁共振(NMR)验证结构, 批次间 HPLC 纯度差异小于 2%。安全数据表明, 该化合物可能具有刺激性, 操作时需佩戴防护手套及护目镜, 避免吸入粉尘或接触皮肤。废弃物应作为有害化学品处理。具体毒理学数据请参考随货提供的材料安全数据表(MSDS)。