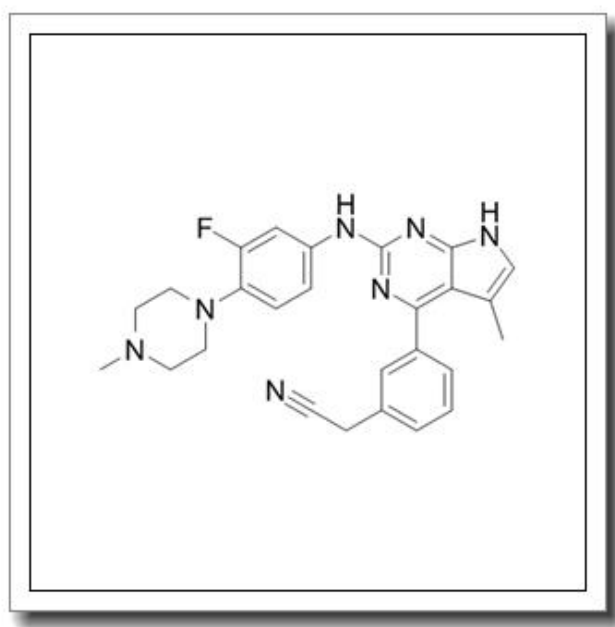


3-[2-[[3-氟-4-(4-甲基-1-哌嗪基)苯基]氨基]-5-甲基-7H-吡咯并[2,3-D]嘧啶-4-基]苯乙腈

2-(3-(2-(3-Fluoro-4-(4-methylpiperazin-1-yl)phenylamino)-5-methyl-7H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidin-4-yl)phenyl)acetonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(3-(2-(3-Fluoro-4-(4-methylpiperazin-1-yl)phenylamino)-5-methyl-7H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidin-4-yl)phenyl)acetonitrile
中文名称	3-[2-[[3-氟-4-(4-甲基-1-哌嗪基)苯基]氨基]-5-甲基-7H-吡咯并[2,3-D]嘧啶-4-基]苯乙腈
CAS 号	1239875-86-5
分子式	C26H26FN7

分子量	455.53
纯度	$\geq 96\%$

产品说明

2-(3-(2-(3-Fluoro-4-(4-methylpiperazin-1-yl)phenylamino)-5-methyl-7H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidin-4-yl)phenyl)acetonitrile 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为高纯度有机化合物，化学名称为 3-[2-[[3-氟-4-(4-甲基-1-哌嗪基)苯基]氨基]-5-甲基-7H-吡咯并[2,3-D]嘧啶-4-基]苯乙腈，CAS 号为 1239875-86-5，分子式 C₂₆H₂₆FN₇，分子量 455.53。其结构包含吡咯并嘧啶核心、氟代苯胺基团及甲基哌嗪侧链，赋予其独特的空间构象和电子分布特性。常温下为白色至类白色结晶粉末，纯度 ≥96% (HPLC 验证)，易溶于 DMSO、DMF 等极性有机溶剂，微溶于甲醇或乙醇，水溶性较差。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是一种靶向蛋白激酶的小分子抑制剂，通过特异性结合 ATP 结合域干扰信号转导通路。其氟原子和氰基的引入显著增强细胞膜穿透性及靶点亲和力，而甲基哌嗪结构可调节溶解性和药代动力学特性。在激酶抑制实验中表现出纳摩尔级活性，对特定癌症相关激酶（如 ALK、EGFR 突变体）具有选择性抑制潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

作为科研用生化试剂，主要用于以下领域：

- 肿瘤学研究：用于构建激酶抑制剂文库，探索耐药性机制或联合用药方案
- 药物开发：作为先导化合物进行结构优化，或用于体外药效学模型验证
- 分子探针：通过荧光标记衍生物研究激酶-底物相互作用动力学

建议使用浓度范围为 0.1-10 μM，需根据具体细胞系或酶体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℃、避光、干燥环境中，开封后建议分装保存以避免反复冻融。工作液现配现用，溶剂推荐使用含 0.1% BSA 的 PBS 缓冲液或细胞培养基。操作时需佩戴防护手套及护目镜，通风橱内完成称量步骤。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、LC-MS 及 ^1H NMR 三重验证，残留溶剂符合 USP 标准。MSDS 数据显示其急性毒性类别为 4 级 ($\text{LD}_{50} > 300 \text{ mg/kg}$)，但可能存在眼睛刺激性。意外接触时立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物处置需符合当地危险化学品管理法规。

注：本产品仅限科研用途，不适用于诊断或治疗应用。具体实验方案请参考文献或咨询专业技术支持。