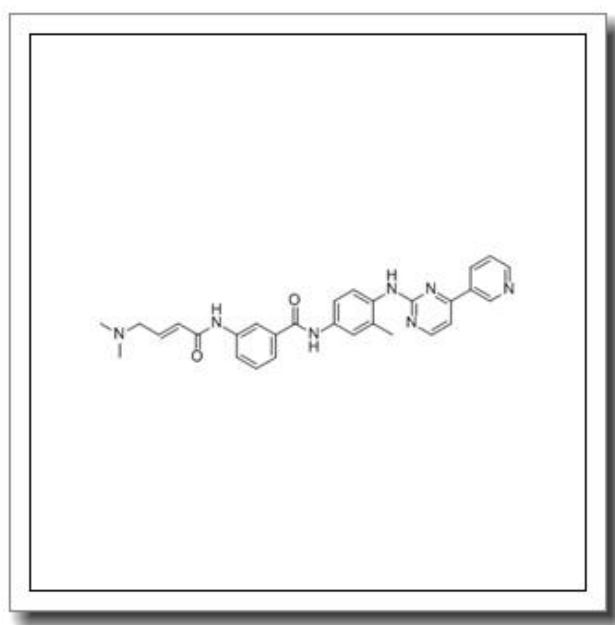


3-[[4-(二甲基氨基)-1-氧代-2-丁烯-1-基]氨基]-N-[3-甲基-4-[[4-(3-吡啶基)-2-嘧啶基]氨基]苯基]苯甲酰胺

3-[[(E)-4-(dimethylamino)but-2-enoyl]amino]-N-[3-methyl-4-[(4-pyridin-3-yl)pyrimidin-2-yl]amino]phenyl]benzamide



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-[[(E)-4-(dimethylamino)but-2-enoyl]amino]-N-[3-methyl-4-[(4-pyridin-3-yl)pyrimidin-2-yl]amino]phenyl]benzamide
中文名称	3-[[4-(二甲基氨基)-1-氧代-2-丁烯-1-基]氨基]-N-[3-甲基-4-[[4-(3-吡啶基)-2-嘧啶基]氨基]苯基]苯甲酰胺
CAS 号	1410880-22-6
分子式	C ₂₉ H ₂₉ N ₇ O ₂
分子量	507.586

纯度	$\geq 96\%$
----	-------------

产品说明

3-[[(E)-4-(二甲基氨基)丁-2-烯酰基]氨基]-N-[3-甲基-4-[(4-吡啶-3-基嘧啶-2-基)氨基]苯基]苯甲酰胺产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学式为 C₂₉H₂₉N₇O₂，分子量 507.586，CAS 号 1410880-22-6。其结构中包含嘧啶环、吡啶环及苯甲酰胺基团，是一种具有特定空间构型的小分子化合物。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，溶解性数据显示易溶于 DMSO (>10 mg/mL)，微溶于甲醇和乙醇，水溶性较差。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物通过选择性抑制特定激酶活性（如 ALK、ROS1 等），干扰异常信号通路传导，在肿瘤细胞增殖和存活中起关键调控作用。其分子设计优化了与靶蛋白 ATP 结合域的相互作用，显示出高亲和力和低纳摩尔级抑制浓度，是研究癌症靶向治疗机制的重要工具分子。

3. 主要应用领域与具体用途

作为激酶抑制剂研究的标准品，广泛应用于以下领域：

- 抗肿瘤药物研发：用于体外细胞实验评估药效及耐药机制
- 信号转导研究：探究 ALK/ROS1 依赖型肿瘤的分子病理学
- 临床前研究：动物模型中的药代动力学和毒理学评估

建议使用浓度需通过预实验确定，常规体外实验起始浓度为 1-10 μM。

4. 储存条件与使用建议

长期储存需避光密封，置于-20℃干燥环境中，有效期 24 个月。开封后建议分装保存，避免反复冻融。使用时需在惰性气体（如氮气）保护下操作，配制溶液现配现用。若出现颜色变化或沉淀，应停止使用。

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（KF 法）及残留溶剂检测数据。本产品属于有害化学品，操作时需穿戴防护装备（手套、护目镜及实验服），避免吸入或皮

肤接触。如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置应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。具体实验方案请参阅相关文献或咨询专业技术支持。