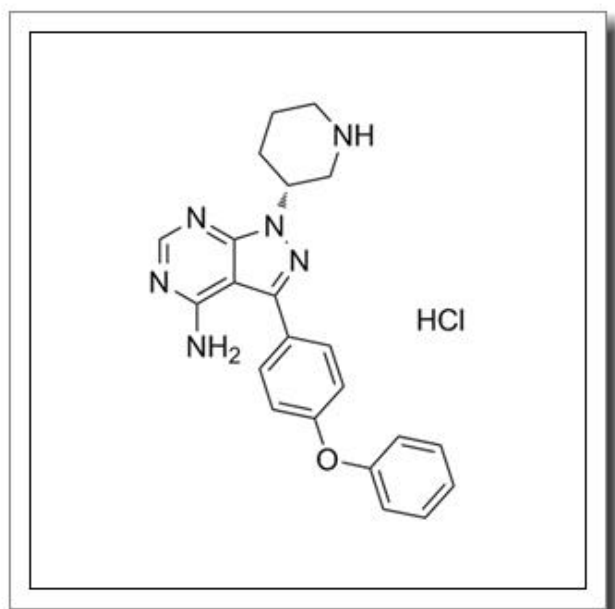


3-(4-苯氧基苯基)-1-(3R)-3-哌啶基-1H-吡唑并[3,4-d]嘧啶-4-胺盐酸盐(1:1)

(R)-3-(4-phenoxyphenyl)-1-(piperidine-3-yl)-1H-pyrazolo[3,4-d]pyrimidin-4-amine hydrochloride



产品基本信息

属性	值
化学名称	(R)-3-(4-phenoxyphenyl)-1-(piperidine-3-yl)-1H-pyrazolo[3,4-d]pyrimidin-4-amine hydrochloride
中文名称	3-(4-苯氧基苯基)-1-(3R)-3-哌啶基-1H-吡唑并[3,4-d]嘧啶-4-胺盐酸盐(1:1)
CAS号	1553977-42-6
分子式	C ₂₂ H ₂₃ C ₁ N ₆ O
分子量	422.911
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品为(R)-3-(4-苯氧基苯基)-1-(哌啶-3-基)-1H-吡唑并[3,4-d]嘧啶-4-胺盐酸盐, 化学式为 C₂₂H₂₃C₁N₆O, 分子量 422.911, CAS 号 1553977-42-6。其结构包含吡唑并嘧啶核心与苯氧基苯基、哌啶基团, 以盐酸盐形式存在, 纯度 ≥96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 易溶于 DMSO 等极性有机溶剂, 水溶性中等, 需避光保存以维持稳定性。

2. 生物化学功能与重要性

作为小分子抑制剂, 该化合物通过选择性靶向特定激酶 (如 ALK、ROS1 等) 发挥抗肿瘤活性。其(R)-构型对立体选择性结合至关重要, 能有效阻断信号通路, 抑制细胞增殖。在癌症研究与药物开发中, 它是验证靶点机制和优化先导化合物的关键工具分子。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于肿瘤学基础研究与药物开发领域, 具体包括: 1) 激酶抑制实验中的阳性对照; 2) 体外细胞模型 (如非小细胞肺癌) 的药效评价; 3) 联合用药方案的机制探索; 4) 结构-活性关系 (SAR) 研究的参考标准。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于-20℃干燥环境中, 避免反复冻融。使用时需平衡至室温后称量, 推荐以 DMSO 配制母液 (10 mM), 分装后-80℃长期保存。工作浓度需根据实验体系优化, 通常体外活性测试范围为 1-100 nM。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 验证纯度 ≥96%, 质谱与核磁确保结构正确。本品属于有害化学品, 操作时需穿戴防护装备 (手套、护目镜), 避免吸入或接触皮肤。如意外暴露, 立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。

(注: 实际应用前请查阅最新文献并遵守所在机构的安全规程。)