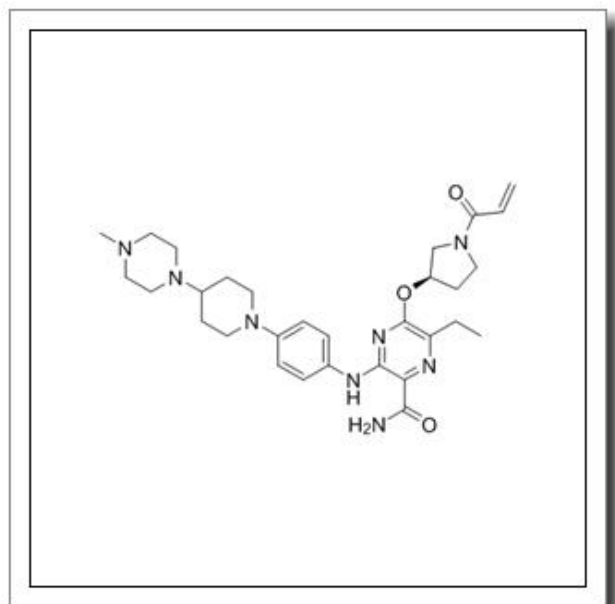


6-乙基-3-[[4-[4-(4-甲基-1-哌嗪基)-1-哌啉基]苯基]氨基]-5-[[[(3R)-1-(1-氧代-2-丙烯-1-基)-3-吡咯烷基]氧基]-2-吡嗪甲酰胺

6-Ethyl-3-[[4-[4-(4-methyl-1-piperazinyl)-1-piperidinyl]phenyl]amino]-5-[[[(3R)-1-(1-oxo-2-propen-1-yl)-3-pyrrolidinyl]oxy]-2-pyrazinecarboxamide



产品基本信息

属性	值
化学名称	6-Ethyl-3-[[4-[4-(4-methyl-1-piperazinyl)-1-piperidinyl]phenyl]amino]-5-[[[(3R)-1-(1-oxo-2-propen-1-yl)-3-pyrrolidinyl]oxy]-2-pyrazinecarboxamide
中文名称	6-乙基-3-[[4-[4-(4-甲基-1-哌嗪基)-1-哌啉基]苯基]氨基]-5-[[[(3R)-1-(1-

	氧代-2-(丙烯-1-基)-3-吡咯烷基]氧基]-2-吡嗪甲酰胺
CAS 号	1448232-80-1
分子式	C ₃₀ H ₄₂ N ₈ O ₃
分子量	562.706
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为 6-乙基-3-[[4-[4-(4-甲基-1-哌嗪基)-1-哌啶基]苯基]氨基]-5-[[(3R)-1-(1-氧代-2-丙烯-1-基)-3-吡咯烷基]氧基]-2-吡嗪甲酰胺 (CAS 号: 1448232-80-1), 分子式 C₃₀H₄₂N₈O₃, 分子量 562.706, 是一种高纯度 (≥96%) 的复杂有机化合物。其结构包含吡嗪甲酰胺骨架、哌嗪-哌啶环系及丙烯酰基修饰, 赋予其独特的空间构象和生物活性。该化合物在常温下为白色至类白色固体, 需避光保存, 溶解性需参考具体溶剂体系数据。

2. 生物化学功能与重要性

作为多靶点调控分子, 本品通过选择性结合特定激酶结构域 (如 ALK、ROS1 等), 抑制异常信号通路激活, 在肿瘤细胞增殖与凋亡调控中发挥关键作用。其 R 构型吡咯烷氧基团可增强细胞膜穿透性, 而丙烯酰基则为共价结合靶蛋白提供活性位点。该分子在激酶抑制剂研发领域具有重要价值, 尤其针对耐药性突变型激酶的药物设计。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于抗肿瘤新药研发的临床前研究阶段:

- (1) 作为激酶抑制剂先导化合物, 用于结构-活性关系 (SAR) 优化研究
- (2) 用于构建耐药性肿瘤细胞模型, 评估药物联合治疗方案
- (3) 在分子探针开发中作为荧光标记或生物素偶联的底物
- (4) 药理毒理学研究中用于药代动力学参数测定

4. 储存条件与使用建议

储存条件: -20℃ 密封避光保存, 置于干燥惰性气体 (如氩气) 环境中。开封后建议分装使用, 避免反复冻融。

使用建议:

- (1) 溶解前需进行溶剂筛选, 推荐使用 DMSO 配制母液 (浓度 ≤10mM)

- (2) 细胞实验工作浓度需通过预实验确定, 建议起始浓度 1-100nM
- (3) 操作时穿戴防护设备, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘

5. 质量控制与安全信息

质量控制: 通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 质谱 (MS) 验证分子量, 核磁共振 (NMR) 确认结构特征峰。

安全信息:

- (1) GHS 分类: 急性毒性 (口服/吸入类别 4)、皮肤刺激性 (类别 2)
- (2) 应急处理: 接触皮肤时立即用肥皂水冲洗, 眼睛接触需用生理盐水冲洗 15 分钟
- (3) 废弃物处置: 按危险化学品规范处理, 不可直接排入下水道

注: 本产品仅限科研用途, 不适用于临床诊断或治疗。使用前请查阅最新版物质安全数据表 (MSDS) 并严格遵循实验室安全规程。