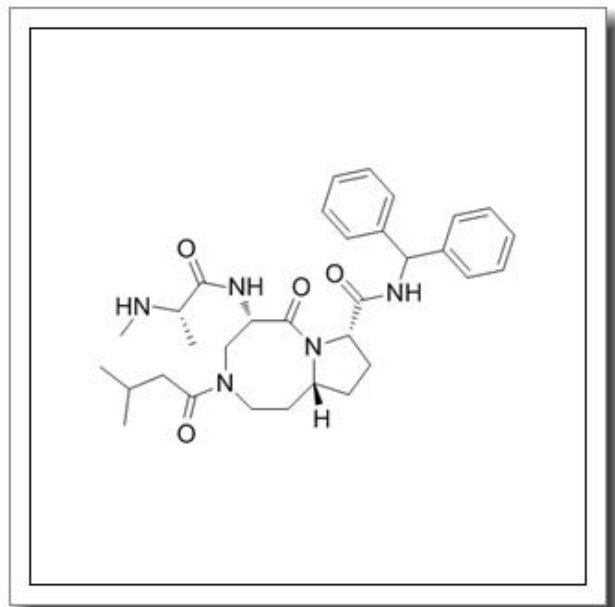


AT-406

(5S, 8S, 10aR)-N-benzhydryl-5-[[(2S)-2-(methylamino)propanoyl]amino]-3-(3-methylbutanoyl)-6-oxo-1, 2, 4, 5, 8, 9, 10, 10a-octahydropyrrolo[1, 2-a][1, 5]diazocine-8-carboxamide



产品基本信息

属性	值
化学名称	(5S, 8S, 10aR)-N-benzhydryl-5-[[(2S)-2-(methylamino)propanoyl]amino]-3-(3-methylbutanoyl)-6-oxo-1, 2, 4, 5, 8, 9, 10, 10a-octahydropyrrolo[1, 2-a][1, 5]diazocine-8-carboxamide
中文名称	AT-406
CAS 号	1071992-99-8
分子式	C32H43N5O4
分子量	561. 715
纯度	≥ 96%

产品说明

AT-406 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

AT-406 是一种高纯度小分子化合物，化学名称为 (5S, 8S, 10aR)-N-benzhydryl-5-[[[(2S)-2-(methylamino)propanoyl]amino]-3-(3-methylbutanoyl)-6-oxo-1,2,4,5,8,9,10,10a-octahydropyrrolo[1,2-a][1,5]diazocine-8-carboxamide，分子式为 C₃₂H₄₃N₅O₄，分子量 561.715。该化合物为白色至类白色结晶粉末，CAS 号为 1071992-99-8，经 HPLC 检测纯度 ≥96%，具有明确的手性中心和复杂的多环结构。

2. 生物化学功能与重要性

AT-406 是一种强效的 Smac 模拟物，可特异性拮抗 IAP（凋亡抑制蛋白）家族成员 XIAP、cIAP1 和 cIAP2。其通过结合 IAP 蛋白的 BIR3 结构域，解除 IAP 对 caspase 的抑制，从而激活内源性凋亡通路。在肿瘤研究中，该化合物因其独特的促凋亡机制，已成为研究细胞凋亡信号转导和肿瘤耐药性的重要工具分子。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于肿瘤生物学研究和抗癌药物开发领域。具体用途包括：作为 IAP 拮抗剂用于体外和体内肿瘤模型研究；用于联合用药研究以克服肿瘤耐药性；作为分子探针研究细胞凋亡信号通路；在药物筛选中作为阳性对照化合物。实验数据显示，其对多种肿瘤细胞系具有纳摩尔级别的活性。

4. 储存条件与使用建议

建议长期储存于 -20℃ 干燥避光环境中，短期使用可置于 4℃ 保存。溶解性测试表明，该化合物易溶于 DMSO（溶解度 >50mg/mL），建议先用 DMSO 配制储存液，再用缓冲液稀释至工作浓度。使用时需注意避光操作，避免反复冻融。建议工作浓度范围为 0.1-10 μM，具体浓度需根据实验体系优化。

5. 质量控制与安全信息

本产品经严格质控，包括 HPLC 纯度分析、质谱鉴定和核磁验证。使用时应穿戴实

验服、手套和防护眼镜，避免直接接触皮肤和眼睛。如发生接触，立即用大量清水冲洗并就医。该化合物可能对胚胎发育有影响，育龄期研究人员需特别防护。废弃物应按照危险化学品处理规范处置。