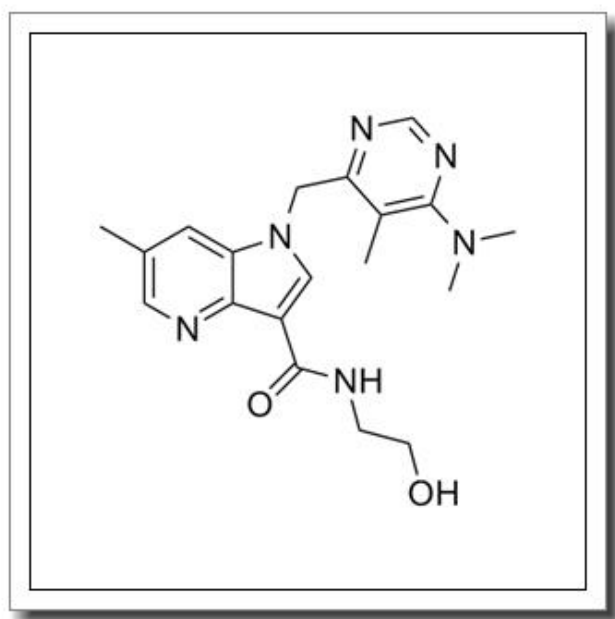


## DprE1-IN-2

*1-{{6-(Dimethylamino)-5-methyl-4-pyrimidinyl}methyl}-N-(2-hydroxyethyl)-6-methyl-1H-pyrrolo[3,2-b]pyridine-3-carboxamide*



### 产品基本信息

属性	值
化学名称	1-{{6-(Dimethylamino)-5-methyl-4-pyrimidinyl}methyl}-N-(2-hydroxyethyl)-6-methyl-1H-pyrrolo[3,2-b]pyridine-3-carboxamide
中文名称	DprE1-IN-2
CAS 号	1615713-87-5
分子式	C19H24N6O2
分子量	368.433
纯度	≥ 96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

DprE1-IN-2 (化学名称: 1-{{6-(二甲基氨基)-5-甲基-4-嘧啶基}甲基}-N-(2-羟乙基)-6-甲基-1H-吡咯并[3,2-b]吡啶-3-甲酰胺) 是一种高纯度小分子抑制剂, CAS 号为 1615713-87-5, 分子式为 C<sub>19</sub>H<sub>24</sub>N<sub>6</sub>O<sub>2</sub>, 分子量为 368.433。该化合物为白色至类白色固体, 纯度 ≥96%, 具有明确的嘧啶和吡咯并吡啶骨架结构, 属于靶向结核分枝杆菌细胞壁合成关键酶 DprE1 的特异性抑制剂。其化学结构中的羟乙基酰胺基团和甲基嘧啶片段赋予其良好的水溶性和靶点结合能力。

### 2. 生物化学功能与重要性

DprE1-IN-2 通过选择性抑制结核分枝杆菌的 DprE1 酶 (脱氢角鲨烯磷酸还原酶), 阻断阿拉伯半乳糖的生物合成, 从而破坏细菌细胞壁完整性。该靶点在抗结核药物研发中具有高度保守性, 使得 DprE1-IN-2 成为研究耐药性结核病机制和开发新型抗生素的重要工具化合物。其抑制作用已通过体外酶活实验和最小抑菌浓度 (MIC) 测定验证。

### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于结核病相关基础研究及药物开发领域, 具体包括:

1. 作为 DprE1 酶活性研究的阳性对照化合物;
2. 用于高通量筛选平台中验证抑制剂候选分子;
3. 在结核分枝杆菌感染模型中评估联合用药方案;
4. 辅助解析 DprE1 蛋白结构与功能关系。实验推荐工作浓度为 0.1-10 μM, 需根据具体细胞模型优化。

### 4. 储存条件与使用建议

产品应严格避光保存于-20℃干燥环境中, 开封后需充入惰性气体保护。溶解建议使用 DMSO 配制 10 mM 母液, 分装后避免反复冻融。水溶液体系需现配现用 (稳定性 <24 小时)。实验操作需在生物安全二级 (BSL-2) 实验室环境下进行, 避免直接接触皮肤或黏膜。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ ，批次间一致性通过 LC-MS 和  $^1\text{H NMR}$  验证。其急性毒性数据（大鼠口服  $\text{LD}_{50} > 500 \text{ mg/kg}$ ）显示为低毒化合物，但仍需遵守实验室化学品通用防护措施：佩戴护目镜、丁腈手套及防护服，若接触皮肤应立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物需按危险化学品规范处置。

（注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合最新文献和实验条件调整。）