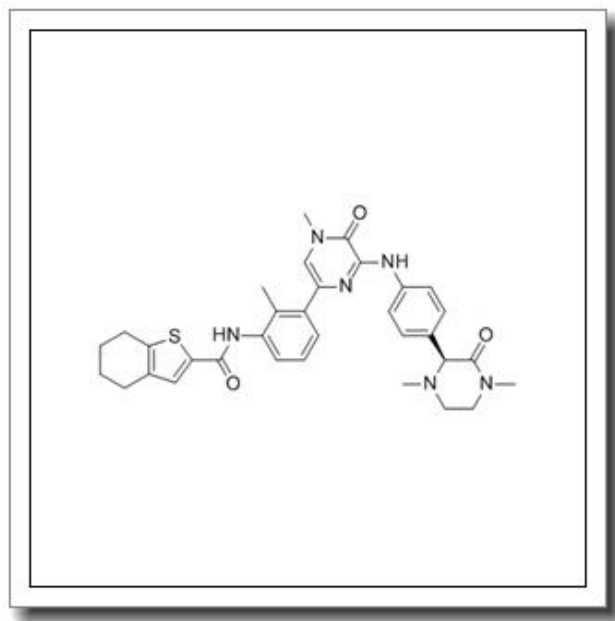


## GDC-0834 S-对映体

*N*-[3-[6-[4-[(2*S*)-1,4-dimethyl-3-oxopiperazin-2-yl]anilino]-4-methyl-5-oxopyrazin-2-yl]-2-methylphenyl]-4,5,6,7-tetrahydro-1-benzothiophene-2-carboxamide



### 产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>N</i> -[3-[6-[4-[(2 <i>S</i> )-1,4-dimethyl-3-oxopiperazin-2-yl]anilino]-4-methyl-5-oxopyrazin-2-yl]-2-methylphenyl]-4,5,6,7-tetrahydro-1-benzothiophene-2-carboxamide
中文名称	GDC-0834 S-对映体
CAS 号	1133432-50-4
分子式	C33H36N6O3S
分子量	596.742
纯度	≥96%

## 产品说明

### GDC-0834 S-对映体产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

GDC-0834 S-对映体是一种高纯度小分子化合物，化学名称为 N-[3-[6-[4-[(2S)-1,4-dimethyl-3-oxopiperazin-2-yl]anilino]-4-methyl-5-oxopyrazin-2-yl]-2-methylphenyl]-4,5,6,7-tetrahydro-1-benzothiophene-2-carboxamide，分子式为 C<sub>33</sub>H<sub>36</sub>N<sub>6</sub>O<sub>3</sub>S，分子量为 596.742。其 CAS 号为 1133432-50-4，纯度 ≥96%。该化合物为白色至类白色固体，具有特定的立体构型（S-构型），在有机溶剂如 DMSO 中溶解性良好，但在水溶液中溶解度较低。

#### 2. 生物化学功能与重要性

GDC-0834 S-对映体是一种选择性 Bruton 酪氨酸激酶（BTK）抑制剂，通过共价结合 BTK 活性位点的半胱氨酸残基（Cys481），不可逆地抑制其活性。BTK 在 B 细胞受体信号通路中起关键作用，因此该化合物在调节免疫反应和抑制 B 细胞恶性肿瘤中具有重要研究价值。其 S-对映体相较于其他异构体表现出更高的靶点亲和力和代谢稳定性，是药物开发与机制研究的理想工具分子。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于以下领域：

1. 药物研发：作为 BTK 抑制剂的先导化合物，用于优化抗肿瘤或自身免疫性疾病药物的活性与选择性。
2. 信号通路研究：用于探究 BTK 依赖性通路在 B 细胞增殖、分化及凋亡中的作用机制。
3. 体外实验：适用于细胞水平的功能验证实验，如激酶活性检测、细胞增殖抑制实验等。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议将产品密封保存于 -20° C 干燥环境中，避免反复冻融与光照。使用时需在惰性气体（如氮气）保护下操作，以维持稳定性。溶解时推荐使用 DMSO 配制母液

(如 10 mM)，并分装保存以降低降解风险。实验浓度需根据具体模型优化，建议起始浓度范围为 0.1-10  $\mu$ M。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 验证纯度  $\geq 96\%$ ，并通过质谱与核磁共振确认结构。使用时需遵守实验室安全规范，穿戴防护装备（手套、护目镜等）。该化合物可能存在刺激性，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。废弃物应按照危险化学品处置标准处理。更多安全数据请参考提供的材料安全数据表（MSDS）。

注：本产品仅限科研用途，不可用于人体或临床治疗。