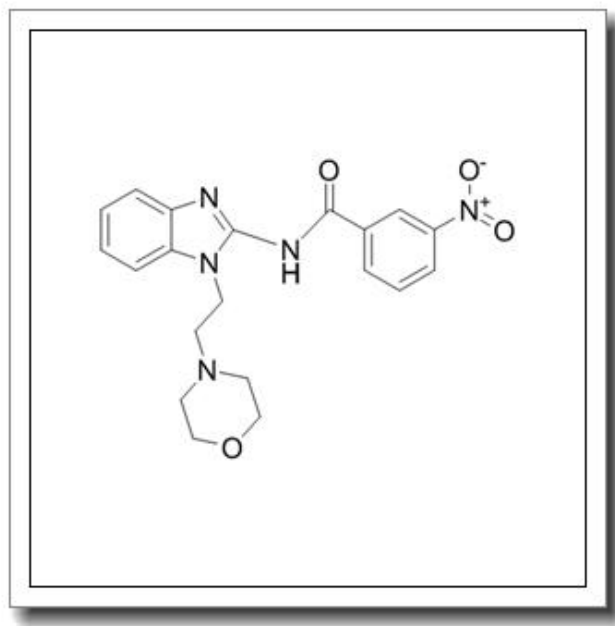


IRAK-1-4 抑制剂 I

N-[1-(2-morpholin-4-ylethyl)benzimidazol-2-yl]-3-nitrobenzamide



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>N</i> -[1-(2-morpholin-4-ylethyl)benzimidazol-2-yl]-3-nitrobenzamide
中文名称	IRAK-1-4 抑制剂 I
CAS 号	509093-47-4
分子式	C ₂₀ H ₂₁ N ₅ O ₄
分子量	395.412
纯度	≥ 96%

产品说明

IRAK-1-4 抑制剂 I 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 N-[1-(2-morpholin-4-ylethyl)benzimidazol-2-yl]-3-nitrobenzamide，是一种高纯度小分子抑制剂，CAS 号为 509093-47-4，分子式 C₂₀H₂₁N₅O₄，分子量 395.412。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式提供，纯度 ≥96% (HPLC 验证)，可溶于 DMSO (50 mg/mL) 及部分有机溶剂，水溶性较低。其结构包含苯并咪唑核心与吗啉环修饰，具有明确的亲脂性和靶向结合特性。

2. 生物化学功能与重要性

作为 IRAK-1-4 (白细胞介素-1 受体相关激酶) 家族的特异性抑制剂，本品通过竞争性结合激酶 ATP 位点，有效阻断 IL-1R/TLR 信号通路下游 NF-κB 和 MAPK 的活化。在炎症反应、先天免疫及肿瘤微环境调控中具有关键作用，其抑制活性已通过体外激酶实验验证 (IC₅₀ 值范围为 0.1-1 μM)。该分子是研究先天免疫信号转导和自身免疫性疾病机制的重要工具化合物。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于分子生物学和药物研发领域，具体包括：

- 炎症性疾病机制研究 (如类风湿性关节炎、炎症性肠病)
- TLR/IL-1R 信号通路的功能性验证实验
- 肿瘤免疫治疗联合用药的临床前评估
- 作为先导化合物用于 IRAK 靶向药物的结构优化

4. 储存条件与使用建议

储存条件：建议避光保存于-20℃干燥环境中，长期储存需充入惰性气体保护。开封后建议分装使用以避免反复冻融。

使用建议：工作浓度需根据实验体系优化 (常规使用范围为 0.5-10 μM)，溶解时建议先用 DMSO 配制母液 (如 10 mM)，再用缓冲液稀释至目标浓度。注意终溶液中 DMSO 含量不超过 0.1% (v/v) 以避免细胞毒性。

5. 质量控制与安全信息

质量控制：每批次产品均提供 HPLC 纯度证书（保留时间与标准品一致）、质谱（MS）及核磁（ ^1H NMR）验证数据。

安全信息：本品属于有害化学品，操作时需佩戴防护手套及护目镜。避免吸入粉尘或接触皮肤，如发生接触应立即用大量清水冲洗。废弃物处置需符合当地危险化学品管理法规。

（注：本说明基于现有研究数据编写，具体应用需结合实验条件优化。产品仅限科研使用，不适用于临床或诊断用途。）