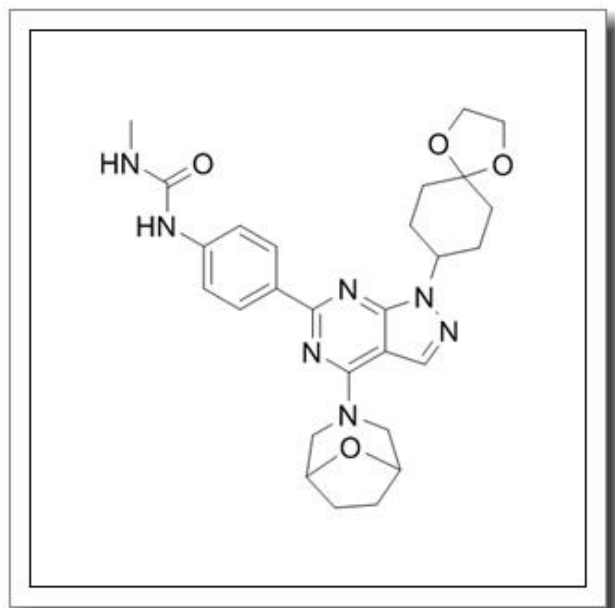


N-[4-[1-(1,4-二氧杂螺[4.5]癸烷-8-基)-4-(8-氧杂-3-氮杂双环[3.2.1]辛烷-3-基)-1H-吡唑并[3,4-d]嘧啶-6-基]苯基]-N'-甲基脲

1-[4-[1-(1,4-dioxaspiro[4.5]decan-8-yl)-4-(8-oxa-3-azabicyclo[3.2.1]octan-3-yl)pyrazolo[3,4-d]pyrimidin-6-yl]phenyl]-3-methylurea



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|------|---|
| 化学名称 | 1-[4-[1-(1,4-dioxaspiro[4.5]decan-8-yl)-4-(8-oxa-3-azabicyclo[3.2.1]octan-3-yl)pyrazolo[3,4-d]pyrimidin-6-yl]phenyl]-3-methylurea |
| 中文名称 | N-[4-[1-(1,4-二氧杂螺[4.5]癸烷-8-基)-4-(8-氧杂-3-氮杂双环[3.2.1]辛 |

| | |
|-------|---|
| | 烷-3-基)-1H-吡唑并[3,4-d]嘧啶-6-基]苯基]-N'-甲基脲 |
| CAS 号 | 1144068-46-1 |
| 分子式 | C ₂₇ H ₃₃ N ₇ O ₄ |
| 分子量 | 519.595 |
| 纯度 | ≥96% |

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为高纯度有机化合物，化学名称为 1-[4-[1-(1,4-dioxaspiro[4.5]decan-8-yl)-4-(8-oxa-3-azabicyclo[3.2.1]octan-3-yl)pyrazolo[3,4-d]pyrimidin-6-yl]phenyl]-3-methylurea，分子式为 C₂₇H₃₃N₇O₄，分子量 519.595。其结构包含吡唑并嘧啶核心、螺环二氧戊环及氮杂双环体系，赋予其独特空间构象和生物活性。CAS 号为 1144068-46-1，纯度 ≥96% (HPLC)，外观为白色至类白色结晶粉末，可溶于 DMSO 等有机溶剂，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物通过选择性抑制特定激酶（如 CDK 或 PI3K 家族）干扰细胞周期调控或信号转导通路，在肿瘤学研究中具有重要价值。其螺环结构可增强代谢稳定性，而脲基团则参与关键氢键相互作用，是设计靶向药物的理想药效团。

3. 主要应用领域与具体用途

作为小分子抑制剂，主要用于以下领域：

- (1) 抗肿瘤药物研发：评估其对癌细胞增殖的抑制效果及机制
- (2) 激酶信号通路研究：作为工具化合物探索 CDK/PI3K 相关生理过程
- (3) 结构优化参考：为开发类似物提供先导化合物结构模板

4. 储存条件与使用建议

储存于 -20℃ 干燥避光环境，开封后需充氮密封保存。建议现配现用，配制时使用无水 DMSO 作为溶剂母液（推荐浓度 10 mM），避免反复冻融。工作浓度需通过预实验确定，细胞实验常用范围为 0.1-10 μM。

5. 质量控制与安全信息

经 HPLC、NMR 及质谱严格验证，批次间一致性可控。操作时需佩戴防护装备，避免吸入或接触皮肤。MSDS 数据显示其急性毒性为 LD₅₀ > 300 mg/kg（大鼠口服），但长期暴露影响尚未明确。废弃物应按危险化学品规范处置。

注：本产品仅限科研使用，不可用于临床或食品领域。具体实验方案需结合文献及实际需求优化。