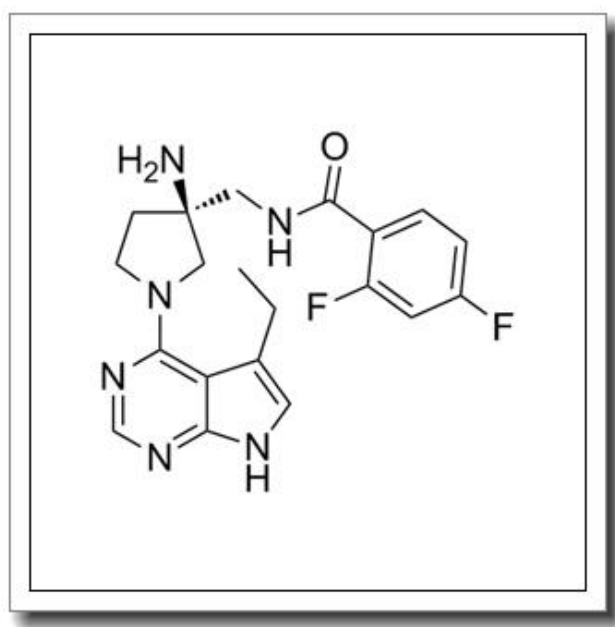


(S)-N-[[3-氨基-1-(5-乙基-7H-吡咯并[2,3-d]嘧啶-4-基)吡咯烷-3-基]甲基]-2,4-二氟苯甲酰胺

N-{[(3S)-3-Amino-1-(5-ethyl-7H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidin-4-yl)-3-pyrrolidiny]methyl}-2,4-difluorobenzamide



产品基本信息

属性	值
化学名称	N-{[(3S)-3-Amino-1-(5-ethyl-7H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidin-4-yl)-3-pyrrolidiny]methyl}-2,4-difluorobenzamide
中文名称	(S)-N-[[3-氨基-1-(5-乙基-7H-吡咯并[2,3-d]嘧啶-4-基)吡咯烷-3-基]甲基]-2,4-二氟苯甲酰胺
CAS 号	1004990-28-6
分子式	C ₂₀ H ₂₂ F ₂ N ₆ O
分子量	400.425

纯度	$\geq 96\%$
----	-------------

产品说明

N- {[(3S)-3-氨基-1-(5-乙基-7H-吡咯并[2,3-d]嘧啶-4-基)-3-吡咯烷基]甲基}-2,4-二氟苯甲酰胺产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为高纯度有机化合物，化学名称如标题所示，CAS 号为 1004990-28-6，分子式为 C₂₀H₂₂F₂N₆O，分子量为 400.425。其结构包含吡咯并嘧啶核心与二氟苯甲酰胺基团，呈现白色至类白色结晶粉末形态。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，符合生化试剂标准。该化合物具有手性中心（3S 构型），需注意光学活性对生物活性的潜在影响。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡咯并嘧啶类衍生物，该分子可通过与特定激酶结合域相互作用，调控细胞信号转导通路。其结构中的二氟苯基增强了膜穿透性，而氨基吡咯烷片段可能参与氢键形成，对靶标选择性具有关键作用。在药物研发中，此类化合物常作为先导分子用于激酶抑制剂开发，尤其在抗肿瘤与抗炎领域具有研究价值。

3. 主要应用领域与具体用途

目前主要应用于以下领域：

- 3.1 药物发现：作为小分子探针用于激酶靶点验证及构效关系研究
- 3.2 分子生物学：用于细胞通路抑制实验，探究 MAPK/PI3K 等相关信号网络
- 3.3 临床前研究：动物模型中的药效学与药代动力学评估
- 3.4 结构生物学：配合 X 射线晶体学解析蛋白质-配体复合物结构

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存：建议密封保存于 -20℃ 干燥环境，避免光照与湿度。长期储存需充惰性气体保护
- 4.2 溶解性：可溶于 DMSO (≥10 mg/mL)，乙醇中溶解度有限，水溶液需现配现用

4.3 操作: 使用前需平衡至室温, 称量时建议在干燥氮气环境下进行

4.4 稳定性: 溶液状态在 4°C 下可保持 48 小时活性, 反复冻融可能导致降解

5. 质量控制与安全信息

5.1 质检标准: 通过 HPLC (UV 254 nm)、质谱及 ¹H NMR 三重验证, 单杂 ≤ 0.5%

5.2 安全警示: 属于刺激性化合物, 操作时需佩戴防护手套及护目镜

5.3 废弃物处理: 按危险有机废物处置, 不可直接排入下水道

5.4 应急处理: 皮肤接触立即用大量清水冲洗, 眼部接触需持续冲洗 15 分钟并就医

注: 本产品仅限科研用途, 不适用于诊断或治疗应用。使用者应具备相关专业资质, 并遵守所在机构的生物安全规范。技术参数可能因批次略有差异, 具体数据以随货质检报告为准。