

# XL888

*2-(butan-2-ylamino)-4-N-[(1R, 5S)-8-[5-(cyclopropanecarbonyl)pyridin-2-yl]-8-azabicyclo[3. 2. 1]octan-3-yl]-5-methylbenzene-1, 4-dicarboxamide*

产品图片未找到

## 产品基本信息

| 属性    | 值  |
|-------|--|
| 化学名称  | 2-(butan-2-ylamino)-4-N-[(1R, 5S)-8-[5-(cyclopropanecarbonyl)pyridin-2-yl]-8-azabicyclo[3. 2. 1]octan-3-yl]-5-methylbenzene-1, 4-dicarboxamide |
| 中文名称  | XL888  |
| CAS 号 | 1149705-71-4   |
| 分子式   | C29H37N5O3   |
| 分子量   | 503. 636   |
| 纯度    | ≥ 96%  |

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

XL888 (化学名称: 2-(butan-2-ylamino)-4-N-[(1R, 5S)-8-[5-(cyclopropanecarbonyl)pyridin-2-yl]-8-azabicyclo[3.2.1]octan-3-yl]-5-methylbenzene-1,4-dicarboxamide) 是一种高纯度有机化合物, CAS 号为 1149705-71-4, 分子式为 C<sub>29</sub>H<sub>37</sub>N<sub>5</sub>O<sub>3</sub>, 分子量为 503.636。该化合物为白色至类白色粉末, 纯度 ≥96%, 具有明确的立体构型 (1R, 5S), 结构中含有吡啶环、双酰胺键和氮杂双环辛烷等特征基团, 表现出良好的脂溶性和稳定性。

### 2. 生物化学功能与重要性

XL888 是一种高效的小分子抑制剂, 主要通过靶向调控 HSP90 (热休克蛋白 90) 信号通路发挥作用。HSP90 在细胞应激响应、蛋白折叠及客户蛋白稳定性中起关键作用。XL888 通过结合 HSP90 的 ATP 结合域, 抑制其分子伴侣功能, 从而诱导客户蛋白 (如激酶、转录因子等) 降解, 在肿瘤微环境调控、炎症反应和神经退行性疾病研究中具有重要价值。

### 3. 主要应用领域与具体用途

XL888 广泛应用于生物医学研究领域, 尤其在癌症治疗机制探索中表现突出。具体用途包括:

- 作为工具化合物, 用于研究 HSP90 依赖性信号通路 (如 PI3K/AKT、RAS/RAF/MEK/ERK) 的调控机制;
- 在体外和体内模型中评估肿瘤细胞增殖、迁移和凋亡的抑制作用;
- 联合用药研究, 探索与化疗药物或靶向疗法的协同效应。

### 4. 储存条件与使用建议

本品需避光保存于 -20° C 干燥环境中, 长期储存建议充氮保护。使用时需恢复至室温并短暂离心以避免吸潮。推荐使用 DMSO 配制母液 (溶解度 ≥10 mM), 工作浓度需根据实验体系优化 (通常为 0.1-10 μM)。避免反复冻融, 分装后保存可延长稳定性。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，核磁共振（NMR）和质谱（MS）验证结构。操作时需穿戴防护装备（手套、护目镜及实验服），避免直接接触皮肤或吸入粉尘。如不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按危险化学品规范处置。本品仅限科研使用，不可用于人体或临床治疗。