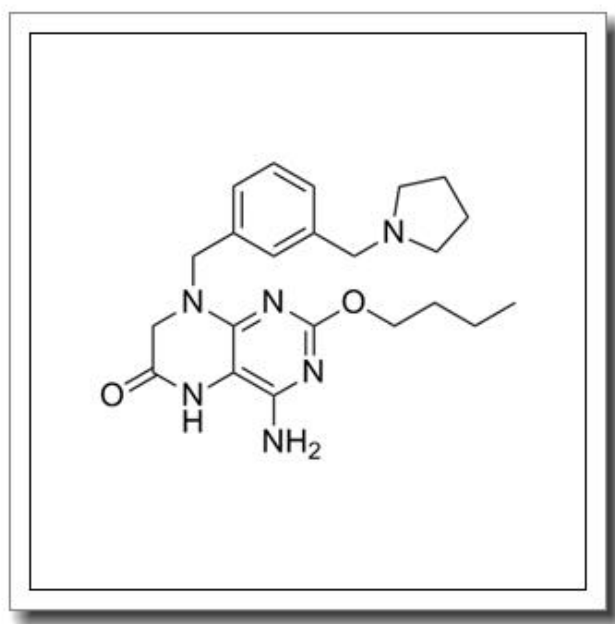


维托莫德

4-amino-2-butoxy-8-[[3-(pyrrolidin-1-ylmethyl)phenyl]methyl]-5,7-dihydropteridin-6-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-amino-2-butoxy-8-[[3-(pyrrolidin-1-ylmethyl)phenyl]methyl]-5,7-dihydropteridin-6-one
中文名称	维托莫德
CAS 号	1228585-88-3
分子式	C22H30N6O2
分子量	410.513
纯度	≥96%

产品说明

4-氨基-2-丁氧基-8-[[3-(吡咯烷-1-基甲基)苯基]甲基]-5,7-二氢蝶啶-6-酮
产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 4-amino-2-butoxy-8-[[3-(pyrrolidin-1-ylmethyl)phenyl]methyl]-5,7-dihydropteridin-6-one, 中文通用名维托莫德 (Vismodegib), CAS 号为 1228585-88-3。其分子式为 C₂₂H₃₀N₆O₂, 分子量 410.513, 是一种高纯度 (≥96%) 的小分子杂环化合物。结构特征包含蝶啶酮母核、丁氧基取代基及吡咯烷甲基苯基修饰, 赋予其独特的疏水性和靶向结合能力。

2. 生物化学功能与重要性

维托莫德是 Hedgehog 信号通路的高效抑制剂, 通过选择性结合 Smoothed (SMO) 受体, 阻断下游 Gli 转录因子的激活。该通路异常活化与多种肿瘤发生密切相关, 因此本品在基础研究与药物开发中具有重要价值。其 IC₅₀ 可达纳摩尔级别, 表现出显著的抗增殖和促凋亡活性。

3. 主要应用领域与具体用途

作为关键生化试剂, 主要用于以下领域:

- 3.1 肿瘤机制研究: 用于基底细胞癌、髓母细胞瘤等 Hedgehog 通路相关疾病的体外/体内模型构建。
- 3.2 药物筛选: 作为阳性对照化合物评估新型 SMO 抑制剂的效价。
- 3.3 临床前研究: 用于药代动力学、毒理学及联合用药方案的实验设计。

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存条件: 建议-20℃避光干燥保存, 长期储存需充惰性气体保护。
- 4.2 溶解性: 可溶于 DMSO (30 mg/mL)、甲醇等有机溶剂, 水溶性较差, 建议配制时超声辅助分散。
- 4.3 工作浓度: 细胞实验推荐起始浓度 0.1-10 μM, 需通过剂量梯度实验优化。

5. 质量控制与安全信息

- 5.1 质量控制：经 HPLC 验证纯度 $\geq 96\%$ ，批次间一致性通过质谱与核磁共振确认。
- 5.2 安全防护：穿戴实验服及丁腈手套操作，避免吸入或接触皮肤。如遇沾染，立即用大量清水冲洗。
- 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。

本产品仅供科研用途，不适用于临床诊断或治疗。使用者应具备相关实验资质并遵守所在机构的生物安全规范。