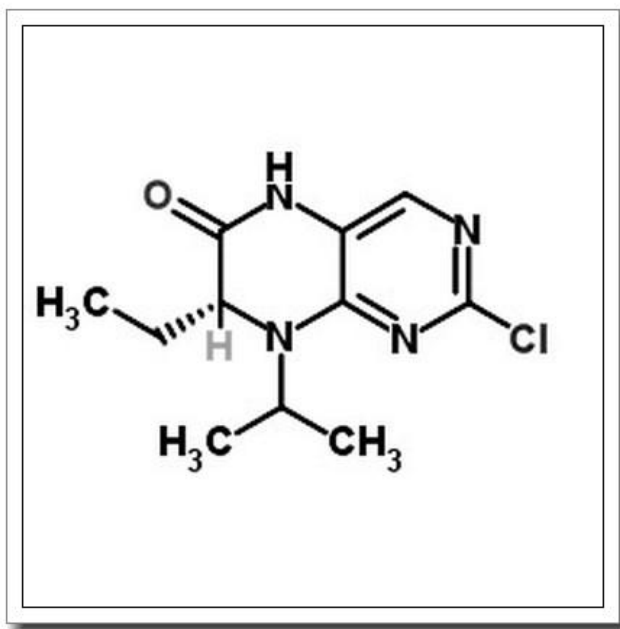


(7R)-2-氯-7-乙基-7,8-二氢-8-(1-甲基乙基)-6(5H)-蝶啶酮

(7R)-2-Chloro-7-ethyl-8-isopropyl-7,8-dihydro-6(5H)-pteridinone



产品基本信息

属性	值
化学名称	(7R)-2-Chloro-7-ethyl-8-isopropyl-7,8-dihydro-6(5H)-pteridinone
中文名称	(7R)-2-氯-7-乙基-7,8-二氢-8-(1-甲基乙基)-6(5H)-蝶啶酮
CAS 号	889877-77-4
分子式	C ₁₁ H ₁₅ ClN ₄ O
分子量	254.716
纯度	>96%

产品说明

(7R)-2-氯-7-乙基-7,8-二氢-8-(1-甲基乙基)-6(5H)-蝶啶酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为(7R)-2-Chloro-7-ethyl-8-isopropyl-7,8-dihydro-6(5H)-pteridinone，CAS号 889877-77-4，分子式 C₁₁H₁₅C₁N₄O，分子量 254.716。其结构中含有一个手性中心（7位 R 构型）和特征性蝶啶酮骨架，纯度经 HPLC 验证 ≥96%。该化合物在常温下稳定，易溶于 DMSO、甲醇等有机溶剂，微溶于水（25℃时溶解度 <0.1 mg/mL）。

2. 生物化学功能与重要性

作为蝶啶类衍生物，该分子可通过竞争性抑制二氢叶酸还原酶（DHFR）干扰叶酸代谢途径，在体外研究中表现出显著的抗增殖活性。其独特的 7 位乙基-异丙基取代结构增强了细胞膜穿透性，而 2 位氯原子则提高了与靶标蛋白的结合亲和力，使其成为研究耐药性肿瘤机制的重要工具化合物。

3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药研发：用于抗肿瘤药物先导化合物的结构优化研究，特别针对 DHFR 过表达型癌症模型
- 3.2 酶学研究：作为 DHFR 酶动力学分析的竞争性抑制剂标准品
- 3.3 分子探针：标记后可用于叶酸代谢通路的荧光示踪实验
- 3.4 农药开发：评估其对病原微生物叶酸合成途径的抑制作用

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存：建议 -20℃ 避光保存于原装容器中，充氮密封条件下保质期 36 个月
- 4.2 复溶：使用前需室温平衡 30 分钟，推荐用无水 DMSO 配制 10 mM 母液（现配现用）
- 4.3 操作：建议在通风橱中佩戴丁腈手套操作，避免吸入粉尘

5. 质量控制与安全信息

- 5.1 质检标准：通过 HPLC（C18 柱，乙腈/水梯度洗脱）检测纯度，批次间 RSD <2%

5.2 安全数据: 根据 GHS 分类属于急性毒性类别 4 (口服), 皮肤刺激类别 2

5.3 应急处理: 眼睛接触时立即用生理盐水冲洗 15 分钟, 皮肤沾染时用肥皂水彻底清洗

5.4 废弃物处置: 应作为有害化学废物交由专业机构处理, 禁止直接排入下水道

注: 本产品仅限科研使用, 不适用于诊断或治疗用途。建议使用者查阅最新版 MSDS 并完成相关实验室安全培训后再行操作。