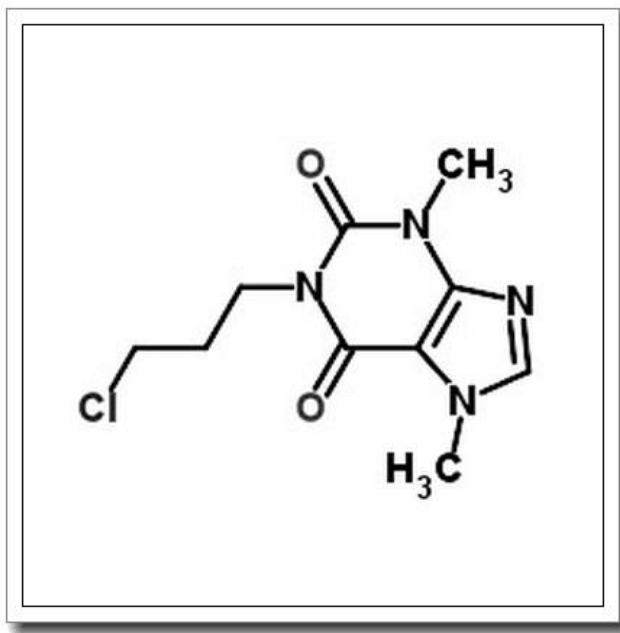


1-(3-氯丙基)可可碱

1-(3-Chloropropyl)-3,7-dimethyl-1H-purine-2,6(3H,7H)-dione



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-(3-Chloropropyl)-3,7-dimethyl-1H-purine-2,6(3H,7H)-dione
中文名称	1-(3-氯丙基)可可碱
CAS 号	74409-52-2
分子式	C ₁₀ H ₁₃ ClN ₄ O ₂
分子量	256.689
纯度	>96%

产品说明

1-(3-氯丙基)可可碱产品说明书

1. 产品概述与化学特性

1-(3-氯丙基)可可碱（化学名称：1-(3-Chloropropyl)-3,7-dimethyl-1H-purine-2,6(3H,7H)-dione）是一种嘌呤类衍生物，CAS 号为 74409-52-2，分子式为 C₁₀H₁₃N₄O₂，分子量为 256.689。本品为白色至类白色结晶性粉末，纯度>96%，具有典型的嘌呤环结构，其 3-氯丙基侧链赋予其独特的化学修饰特性。该化合物在常温下稳定，微溶于水，易溶于有机溶剂如 DMSO 和甲醇。

2. 生物化学功能与重要性

作为可可碱的衍生物，该化合物通过嘌呤环结构与生物体内的腺苷受体和磷酸二酯酶（PDE）等靶点相互作用，可能影响环核苷酸（如 cAMP/cGMP）信号通路。其氯丙基侧链增强了分子的脂溶性，有利于细胞膜穿透，在药物化学中常用于结构修饰以优化药代动力学性质。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发领域，作为嘌呤类药物的中间体或先导化合物，可用于合成心血管药物、神经保护剂或抗炎药物。此外，在生化研究中可作为工具分子，用于探究嘌呤受体亚型的功能或开发新型 PDE 抑制剂。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于-20° C 干燥避光环境中，长期储存需充入惰性气体保护。使用时需在干燥环境下操作，避免反复冻融。溶解推荐使用 DMSO 配制母液（浓度≤10 mM），并进一步用缓冲液稀释至工作浓度。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度>96%，重金属含量<10 ppm。安全数据表明其具有刺激性，操作时应穿戴防护手套、护目镜及实验服，避免吸入或接触皮肤。若发生暴露，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。

注：本说明仅限科研用途，不适用于诊断或治疗。具体应用需进一步验证其安全性和有效性。