

2-(6-morpholin-4-ylpyrimidin-4-yl)-4-(triazol-1-yl)-1H-pyrazol-3-one

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(6-morpholin-4-ylpyrimidin-4-yl)-4-(triazol-1-yl)-1H-pyrazol-3-one
产品目录号	
CAS 号	1154028-82-6
分子式	C ₁₃ H ₁₄ N ₈ O ₂
分子量	314.303
纯度	>96%

产品说明

2-(6-吗啉-4-基嘧啶-4-基)-4-(三唑-1-基)-1H-吡唑-3-酮产品说明书

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 2-(6-morpholin-4-ylpyrimidin-4-yl)-4-(triazol-1-yl)-1H-pyrazol-3-one，CAS 号 1154028-82-6，分子式 C₁₃H₁₄N₈O₂，分子量 314.303。其结构融合嘧啶、吗啉、三唑及吡唑酮等活性基团，呈现多杂环协同效应。常温下为白色至类白色结晶粉末，纯度经 HPLC 验证 ≥96%，易溶于 DMSO 等极性有机溶剂，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为激酶抑制剂的核心骨架，可通过选择性结合 ATP 结合域调控信号通路。其吗啉基团增强亲水性，三唑环提供金属配位能力，而吡唑酮结构则赋予酸碱双重特性，在药物设计中常用于优化生物利用度与靶标亲和力。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于抗肿瘤药物研发，特别是针对 PI3K/mTOR 等激酶靶点的小分子抑制剂开发。在体外实验中可用于：

1. 激酶活性抑制试验的阳性对照
2. 细胞凋亡机制研究的工具化合物
3. 结构-活性关系 (SAR) 研究的母核结构
4. 药物代谢动力学模型的探针分子

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃干燥避光环境，开封后需充氮密封保存。建议：

1. 使用前室温平衡 30 分钟以避免吸湿
2. 配制溶液时优先选用预脱气 DMSO
3. 细胞实验工作浓度需通过 MTT 法预先验证
4. 避免与强氧化剂、重金属盐类共存

5. 质量控制与安全信息

经 LC-MS 验证无重金属残留 (Pb<10ppm)，微生物限度符合 USP 标准。安全数据：

1. GHS 分类：急性毒性（口服）Category 4
2. 防护措施：操作时需佩戴 N95 口罩及丁腈手套
3. 应急处理：眼部接触立即用生理盐水冲洗 15 分钟
4. 废弃物处置：按危险有机废物分类收集

本产品仅供科研用途，不适用于临床或食品领域。具体实验方案建议参考文献
DOI:10.1021/acs.jmedchem.5b01234。