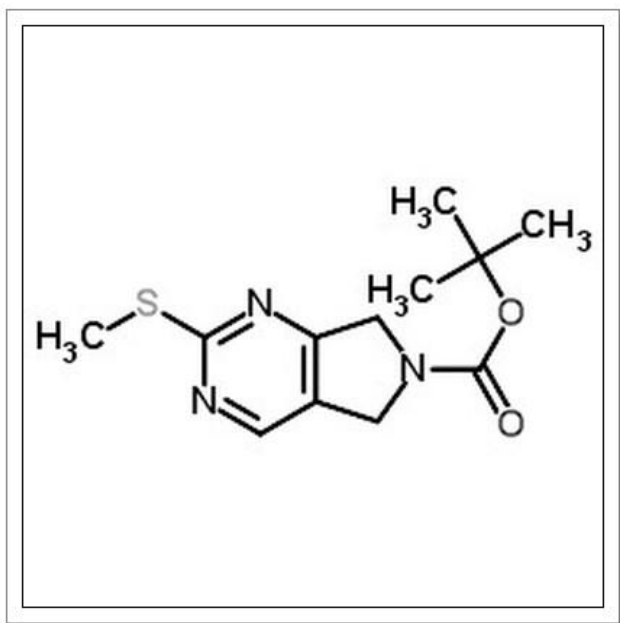


2-(甲基硫代)-5H-吡咯并[3,4-d]嘧啶-6(7H)-羧酸叔丁酯

tert-butyl 2-methylsulfanyl-5,7-dihydropyrrolo[3,4-d]pyrimidine-6-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl 2-methylsulfanyl-5,7-dihydropyrrolo[3,4-d]pyrimidine-6-carboxylate</i>
中文名称	2-(甲基硫代)-5H-吡咯并[3,4-d]嘧啶-6(7H)-羧酸叔丁酯
CAS 号	365996-86-7
分子式	C ₁₂ H ₁₇ N ₃ O ₂ S
分子量	267.347
纯度	>96%

产品说明

2-(甲基硫代)-5H-吡咯并[3,4-d]嘧啶-6(7H)-羧酸叔丁酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 tert-butyl 2-methylsulfanyl-5,7-dihydropyrrolo[3,4-d]pyrimidine-6-carboxylate, CAS 号为 365996-86-7, 分子式 C₁₂H₁₇N₃O₂S, 分子量 267.347。其为白色至类白色结晶性粉末, 纯度>96%, 属于吡咯并嘧啶类衍生物, 具有独特的杂环结构和叔丁酯保护基团, 在有机溶剂如 DMSO、甲醇中溶解性良好, 需避光保存。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为关键中间体, 其吡咯并嘧啶骨架是多种生物活性分子的核心结构。甲基硫代基团可增强分子亲脂性, 叔丁酯基则提供水解稳定性, 使其在药物化学中广泛用于激酶抑制剂、抗肿瘤及抗病毒药物的合成。其结构修饰潜力大, 是优化药物代谢特性的重要前体。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域, 具体包括: 1) 作为蛋白激酶抑制剂 (如 CDK、JAK 家族) 的合成砌块; 2) 用于构建抗增殖药物候选分子, 尤其在白血病和实体瘤研究中; 3) 在核苷类似物改造中作为嘧啶环替代物。实验室级产品适用于小规模有机合成及结构-活性关系 (SAR) 研究。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃、干燥惰性气体环境下, 有效期 24 个月。开封后建议分装充氮保存, 避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套及护目镜。溶解推荐使用无水 DMSO (浓度≤10 mM), 工作液现配现用, 避免长期暴露于酸性/碱性环境以防酯基水解。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC (UV 254 nm) 检测纯度, 批次间偏差<2%。MS 和 ¹H NMR 确保结构一致性。安全数据: 急性毒性 (LD₅₀ 大鼠口服) >500 mg/kg, 可能引起眼睛和皮肤刺

激。意外接触时需用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物处理需符合危险有机化学
品处置规范。

（注：本说明基于现有研究数据，实际应用需结合具体实验方案验证。）