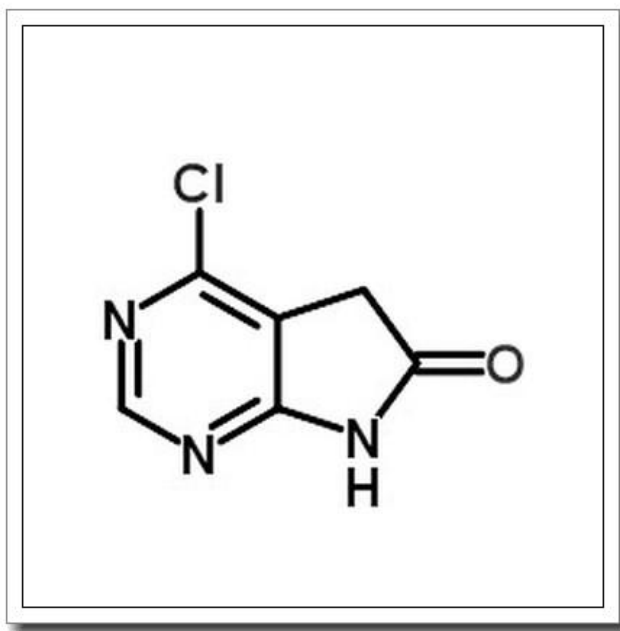


# 4-氯-5,7-二氢-6H-吡咯并[2,3-D]嘧啶-6-酮

*4-chloro-5,7-dihydropyrrolo[2,3-d]pyrimidin-6-one*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	4-chloro-5,7-dihydropyrrolo[2,3-d]pyrimidin-6-one
中文名称	4-氯-5,7-二氢-6H-吡咯并[2,3-D]嘧啶-6-酮
CAS 号	346599-63-1
分子式	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> ClN <sub>3</sub> O
分子量	169.568
纯度	>96%

## 产品说明

### 4-氯-5,7-二氢-6H-吡咯并[2,3-D]嘧啶-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-chloro-5,7-dihydropyrrolo[2,3-d]pyrimidin-6-one, CAS 号为 346599-63-1, 是一种高纯度杂环化合物。其分子式为 C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>ClN<sub>3</sub>O, 分子量为 169.568, 纯度经 HPLC 验证大于 96%。该化合物为白色至类白色结晶粉末, 具有吡咯并嘧啶骨架结构, 氯原子取代基赋予其独特的反应活性, 可溶于 DMSO 等有机溶剂, 微溶于水。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为嘌呤类似物衍生物, 该化合物可通过竞争性抑制参与核酸代谢的酶类 (如激酶或磷酸二酯酶), 干扰 DNA/RNA 合成途径。其核心结构能够模拟天然核苷酸碱基, 在药物化学中常作为关键中间体用于构建靶向肿瘤或炎症相关信号通路的抑制剂, 尤其在蛋白激酶抑制剂开发中具有重要价值。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本品主要用于以下方向: 一是作为 JAK 激酶抑制剂、CDK 抑制剂等小分子抗肿瘤药物的合成砌块; 二是在核苷类抗病毒药物结构改造中作为修饰基团; 三是在化学生物学研究中用于探针分子设计。此外, 在农用化学品开发中也可作为杀菌剂或植物生长调节剂的先导化合物。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议长期储存于-20℃、避光、干燥的惰性气体环境中, 短期使用可保存于 2-8℃。开封后需充氮密封, 防止吸湿降解。实验操作应在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解时优先选用 DMSO 配制母液, 并根据实验体系进行梯度稀释, 注意验证溶剂兼容性。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱 (MS) 和核磁共振 (NMR) 双重验证结构, HPLC 检测显示单一主峰。安全数据表明其属于刺激性化学品, 操作需佩戴防护手套及护目镜。如意外接触眼

睛，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合危险化学品管理规范，建议通过专业机构进行无害化处理。

注：具体实验方案请结合文献方法优化，本说明所述内容不可替代专业安全评估。