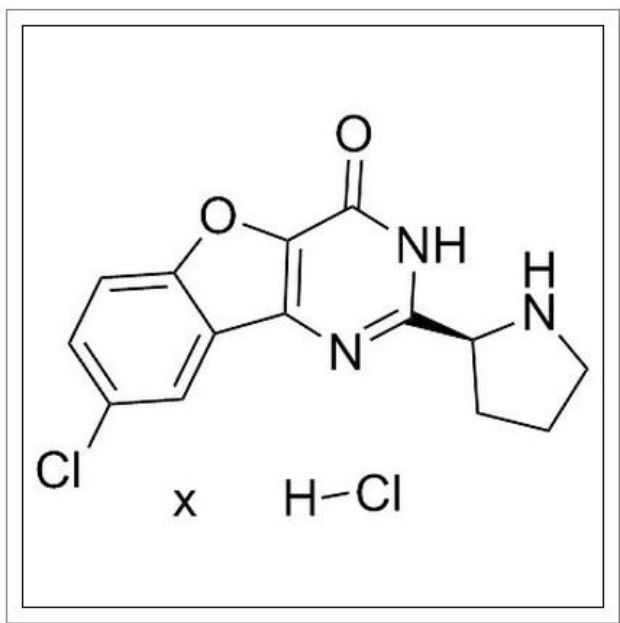


8-氯-2-(2S)-2-吡咯烷基苯并呋喃并 [3,2-d]嘧啶-4(3H)-酮盐酸盐

8-chloro-2-[(2S)-pyrrolidin-2-yl]-1H-[1]benzofuro[3,2-d]pyrimidin-4-one, hydrochloride



产品基本信息

属性	值
化学名称	8-chloro-2-[(2S)-pyrrolidin-2-yl]-1H-[1]benzofuro[3,2-d]pyrimidin-4-one, hydrochloride
中文名称	8-氯-2-(2S)-2-吡咯烷基苯并呋喃并[3,2-d]嘧啶-4(3H)-酮盐酸盐
CAS 号	1169562-71-3
分子式	C ₁₄ H ₁₂ C ₁ N ₃ O ₂ · xHCl
分子量	326.178
纯度	>96%

产品说明

8-氯-2-(2S)-2-吡咯烷基苯并呋喃并[3, 2-d]嘧啶-4(3H)-酮盐酸盐产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 8-chloro-2-[(2S)-pyrrolidin-2-yl]-1H-[1]benzofuro[3, 2-d]pyrimidin-4-one, hydrochloride, CAS 号 1169562-71-3, 分子式 $C_{14}H_{12}ClN_3O_2 \cdot xHCl$, 分子量 326.178。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 >96%, 属于苯并呋喃嘧啶酮类衍生物, 其结构中含手性吡咯烷基团和氯代苯并呋喃骨架, 盐酸盐形式提高了水溶性和稳定性。

2. 生物化学功能与重要性

该分子通过选择性结合特定激酶或受体, 在细胞信号转导中发挥调控作用。其苯并呋喃嘧啶酮核心结构可模拟 ATP 结合位点, 而 S 构型吡咯烷基团增强了立体选择性, 在药物研发中常用于靶向蛋白激酶抑制剂的设计。盐酸盐形式进一步优化了其生物利用度, 使其成为先导化合物优化的重要中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

作为高价值医药中间体, 主要用于以下领域:

- 1) 抗肿瘤药物研发: 靶向 PI3K/mTOR 等信号通路抑制剂的合成
- 2) 神经科学研究: 潜在用于阿尔茨海默症相关 tau 蛋白磷酸化调控
- 3) 激酶抑制剂筛选: 作为 JAK2、CDK 等激酶的候选化合物模板
- 4) 结构生物学: 用于蛋白-配体共结晶实验以解析结合位点

4. 储存条件与使用建议

储存于 -20°C 干燥避光环境, 开封后需充氮密封保存。建议使用前室温平衡 30 分钟以避免吸湿。溶解时优先选用 DMSO 或甲醇 (浓度 ≤ 10 mM), 水溶液需现配现用。操作时穿戴防护装备, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC (UV 254 nm) 和质谱进行纯度验证, 批号相关 COA 随货提供。该化合物

属于刺激性化学品，CAS 1169562-71-3 对应的 GHS 分类为 H302-H315-H319-H335，需在通风橱中操作。废弃物应作为有害化学废料处理，严禁直接排放。

（注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验体系进行验证。）