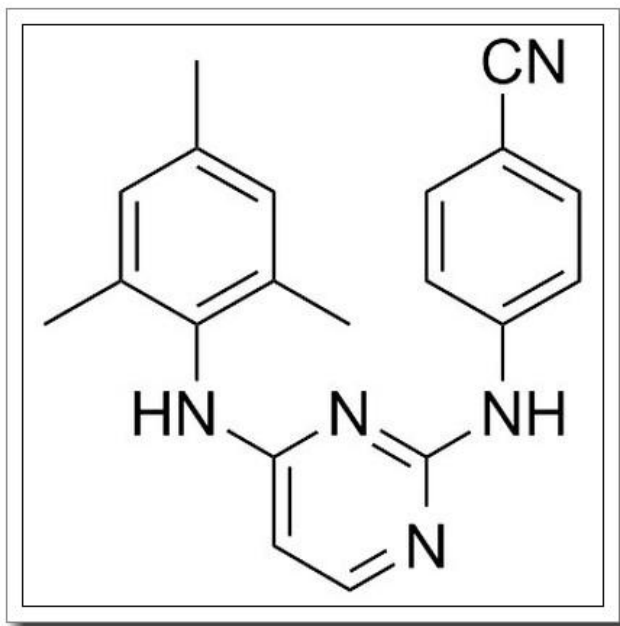


# Dapivirine

*4-[[4-(2,4,6-trimethylanilino)pyrimidin-2-yl]amino]benzonitrile*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	4-[[4-(2,4,6-trimethylanilino)pyrimidin-2-yl]amino]benzonitrile
中文名称	Dapivirine
CAS 号	244767-67-7
分子式	C <sub>20</sub> H <sub>19</sub> N <sub>5</sub>
分子量	329.398
纯度	>96%

## 产品说明

4-[[4-(2,4,6-三甲基苯胺基)嘧啶-2-基]氨基]苯甲腈 (Dapivirine) 产品说明书

### 1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 4-[[4-(2,4,6-三甲基苯胺基)嘧啶-2-基]氨基]苯甲腈, 简称 Dapivirine, CAS 号为 244767-67-7, 分子式为 C<sub>20</sub>H<sub>19</sub>N<sub>5</sub>, 分子量为 329.398。外观为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 ≥96%。该化合物属于非核苷类逆转录酶抑制剂 (NNRTI), 具有高度疏水性, 微溶于有机溶剂如 DMSO 和甲醇, 几乎不溶于水。其结构中的嘧啶环和苯甲腈基团为其生物活性提供了关键作用位点。

### 2. 生物化学功能与重要性

Dapivirine 通过特异性结合 HIV-1 逆转录酶的疏水口袋, 干扰病毒 RNA 依赖的 DNA 聚合过程, 从而有效抑制病毒复制。其作用机制与经典 NNRTIs (如奈韦拉平) 类似, 但具有更强的结合亲和力和更低的耐药突变风险。研究表明, 该化合物对 HIV-1 临床分离株的 EC<sub>50</sub> 值在纳摩尔级别, 是抗艾滋病药物研发的重要候选分子。

### 3. 主要应用领域与具体用途

目前 Dapivirine 的主要应用集中于 HIV 预防领域:

- 3.1 作为阴道环 (如 FDA 批准的 Dapivirine 环) 的核心成分, 用于女性 HIV 暴露前预防 (PrEP)。
- 3.2 用于局部微杀菌剂 (Microbicide) 的配方开发, 可与其他抗病毒药物 (如替诺福韦) 联用。
- 3.3 基础研究中作为 NNRTI 作用机制研究的工具化合物。

### 4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存条件: 需避光密封保存于 -20° C 干燥环境中, 长期储存建议充氮保护。
- 4.2 溶解建议: 推荐使用 DMSO 配制母液 (最高浓度可达 10 mM), 使用时用缓冲

液稀释至工作浓度。

4.3 稳定性：溶液状态在 4° C 下可保存 7 天，避免反复冻融。

#### 5. 质量控制与安全信息

5.1 质量控制：通过 HPLC 检测纯度，质谱（MS）和核磁（NMR）验证结构。

5.2 安全警示：本品属于实验用化学品，非药用规格。操作时需佩戴防护手套及护目镜，避免吸入或皮肤直接接触。

5.3 废弃物处理：按危险化学品处置规范处理，不可直接排入下水道。

注：本产品仅限科研用途，不适用于临床治疗。具体实验方案需参考最新文献或咨询专业毒理学家。