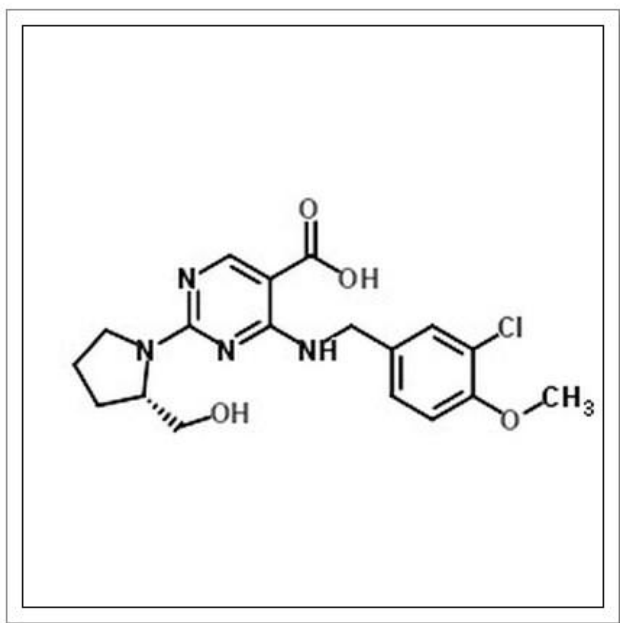


# S)-4-(3-氯-4-甲氧基苯氨基)-5-羧基-2-(2-羟甲基-1-吡咯基)嘧啶

*4-[(3-chloro-4-methoxyphenyl)methylamino]-2-[(2S)-2-(hydroxymethyl)pyrrolidin-1-yl]pyrimidine-5-carboxylic acid*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	4-[(3-chloro-4-methoxyphenyl)methylamino]-2-[(2S)-2-(hydroxymethyl)pyrrolidin-1-yl]pyrimidine-5-carboxylic acid
中文名称	S)-4-(3-氯-4-甲氧基苯氨基)-5-羧基-2-(2-羟甲基-1-吡咯基)嘧啶
CAS 号	330785-84-7
分子式	C <sub>18</sub> H <sub>21</sub> ClN <sub>4</sub> O <sub>4</sub>
分子量	392.837
纯度	>96%

## 产品说明

4-[(3-氯-4-甲氧基苯基)甲基氨基]-2-[(2S)-2-(羟甲基)吡咯烷-1-基]嘧啶-5-羧酸产品说明书

### 1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 4-[(3-chloro-4-methoxyphenyl)methylamino]-2-[(2S)-2-(hydroxymethyl)pyrrolidin-1-yl]pyrimidine-5-carboxylic acid，分子式 C<sub>18</sub>H<sub>21</sub>ClN<sub>4</sub>O<sub>4</sub>，分子量 392.837，CAS 号 330785-84-7。其结构中含嘧啶环、手性吡咯烷基团及羧酸官能团，具有两性化合物特性，在极性有机溶剂中溶解性良好，水溶性中等。产品经 HPLC 检测纯度 >96%，符合生化试剂标准。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为选择性激酶抑制剂的核心结构，可通过竞争性结合 ATP 位点调控多种信号转导通路。其手性中心(S 构型)对生物活性具有决定性作用，氯代甲氧苯基模块增强靶标亲和力，而羧基则赋予分子可修饰性。在药物研发中常用于先导化合物优化，特别适用于 EGFR、VEGFR 等酪氨酸激酶相关研究。

### 3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于肿瘤学研究和抗血管生成药物开发领域：

- (1) 作为激酶抑制剂候选分子用于体外酶活性测试
- (2) 构建抗癌药物组合物的关键中间体
- (3) 细胞信号转导研究的工具化合物
- (4) 结构-活性关系(SAR)研究的参照标准品

### 4. 储存条件与使用建议

长期储存需置于-20℃干燥避光环境，短期使用可存放于 2-8℃。建议开封后充入惰性气体保护，避免反复冻融。使用前需恢复至室温并短暂离心，配制工作液推荐使用 DMSO 作为初始溶剂，后续用缓冲液稀释至所需浓度。注意溶液 pH 值需维持在 6.0-7.5 以保持稳定性。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱(MS)、核磁共振(NMR)和高效液相色谱(HPLC)三重验证,批号相关分析证书随货提供。操作时需佩戴防护手套及护目镜,避免吸入粉尘或接触皮肤。如发生意外接触,立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应作为有害化学品处置,遵守当地环保法规。

注:本说明所述信息基于现有研究数据,具体应用需根据实验体系进行优化。产品仅限科研使用,不适用于诊断或治疗用途。