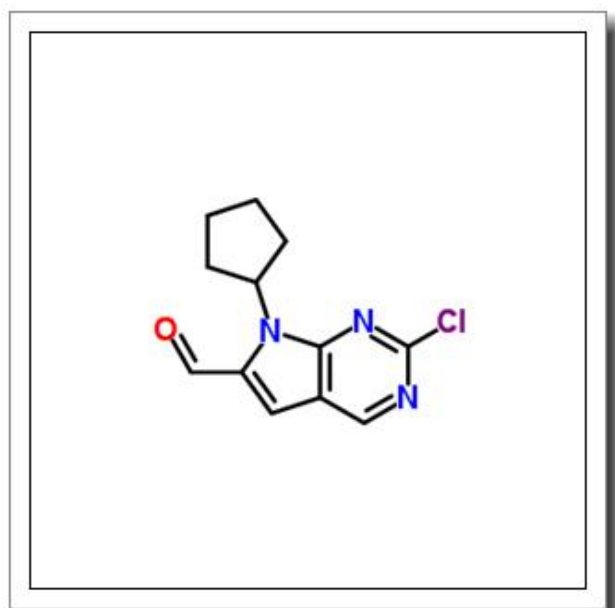


2-Chloro-7-cyclopentyl-7H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidine-6-carbaldehyde

2-Chloro-7-cyclopentyl-7H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidine-6-carbaldehyde



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Chloro-7-cyclopentyl-7H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidine-6-carbaldehyde
中文名称	2-Chloro-7-cyclopentyl-7H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidine-6-carbaldehyde
CAS 号	1211443-55-8
分子式	C ₁₂ H ₁₂ ClN ₃ O
分子量	249.696
纯度	≥96%

产品说明

2-氯-7-环戊基-7H-吡咯并[2,3-d]嘧啶-6-甲醛产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 2-Chloro-7-cyclopentyl-7H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidine-6-carbaldehyde, CAS 号为 1211443-55-8, 分子式 C₁₂H₁₂ClN₃O, 分子量 249.696。该化合物是一种高纯度 (≥96%) 的杂环类有机中间体, 结构特征为吡咯并嘧啶骨架, 含氯取代基和醛基官能团, 具有显著的化学反应活性。其环戊基侧链增强了疏水性, 适合作为药物化学中的关键合成砌块。

2. 生物化学功能与重要性

作为嘌呤类似物衍生物, 该化合物可通过干扰核苷酸代谢途径发挥生物活性。其醛基可作为亲电反应位点, 与氨基或巯基发生缩合反应, 适用于共价抑制剂开发。在激酶抑制剂设计中, 吡咯并嘧啶核心结构能模拟 ATP 结合域, 具有成为靶向抗肿瘤药物先导化合物的潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于医药研发领域:

- 3.1 作为 JAK/STAT 信号通路抑制剂的合成前体
- 3.2 用于构建 BTK (布鲁顿酪氨酸激酶) 共价抑制剂
- 3.3 在 DNA 损伤修复机制研究中作为工具化合物
- 3.4 作为荧光标记探针的醛基修饰平台

4. 储存条件与使用建议

储存条件: 需避光保存于-20℃惰性气体环境, 开封后建议分装使用。

使用建议:

- 4.1 溶解性测试显示易溶于 DMSO (50mg/mL), 建议先用 DMSO 配制母液
- 4.2 醛基易被氧化, 反应体系需排除氧气
- 4.3 避免与强还原剂 (如 NaBH₄) 直接接触

5. 质量控制与安全信息

质量控制：通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，批次间保留时间偏差 $< 0.5\%$ 。

安全信息：

- 5.1 GHS 分类：皮肤致敏性（Category 1B），急性毒性（口服 Category 4）
- 5.2 操作时需佩戴护目镜与丁腈手套，在通风橱中进行称量
- 5.3 废弃物应作为有害化学品处置，符合当地环保法规

本产品仅供科研用途，不适用于临床或食品领域。具体应用前请查阅最新文献并开展预实验验证。