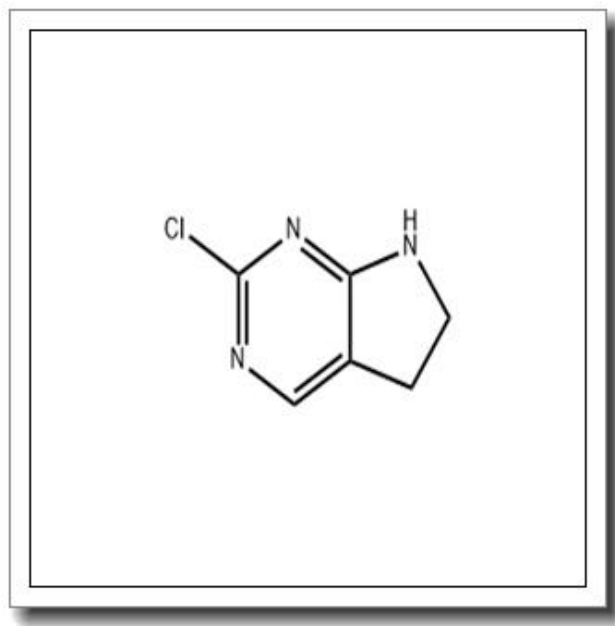


# 2-氯-6,7-二氢-5H-吡咯并[2,3-D]嘧啶

*2-Chloro-6,7-dihydro-5H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidine*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Chloro-6,7-dihydro-5H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidine
中文名称	2-氯-6,7-二氢-5H-吡咯并[2,3-D]嘧啶
CAS 号	1367986-07-9
分子式	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> ClN <sub>3</sub>
分子量	155.58
纯度	≥96%

## 产品说明

2-氯-6,7-二氢-5H-吡咯并[2,3-D]嘧啶 (2-Chloro-6,7-dihydro-5H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidine) 是一种重要的杂环化合物, CAS 号为 1367986-07-9, 分子式为 C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>ClN<sub>3</sub>, 分子量为 155.58。该化合物为白色至类白色固体, 纯度 ≥96%, 具有吡咯并嘧啶骨架结构, 其 2 位氯原子赋予其较高的反应活性, 可作为有机合成中的关键中间体。

### 1. 产品概述与化学特性

该化合物属于吡咯并嘧啶类衍生物, 其结构融合了吡咯环和嘧啶环的双重特性, 具有显著的芳香性和电子离域效应。氯原子的引入增强了其亲电取代反应能力, 使其在偶联反应和亲核取代反应中具有广泛应用潜力。其熔点和溶解度数据需通过实验测定, 建议在干燥惰性气体环境下保存以避免水解。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为嘧啶类生物碱类似物, 该化合物可通过干扰核酸代谢发挥生物活性。其结构特征与多种激酶抑制剂的药效团高度契合, 在药物研发中常用于构建靶向蛋白激酶的小分子抑制剂, 尤其在抗肿瘤和抗炎药物设计中具有重要价值。

### 3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药中间体合成领域, 具体用途包括:

- 用于合成酪氨酸激酶抑制剂的前体化合物
- 作为构建 CDK4/6 抑制剂的核心骨架
- 在新型抗纤维化药物开发中作为关键砌块
- 用于制备 PET 显影剂的标记前体

### 4. 储存条件与使用建议

建议储存于-20℃、干燥惰性气氛(如氮气或氩气)保护的密闭容器中, 避免光照和湿度。使用前需在干燥箱中恢复至室温, 开封后建议一次性使用完毕。溶解性测试表明其在 DMSO 和 DMF 中具有良好溶解性, 操作时需使用防化手套和护目镜。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，批次间差异控制在 $\pm 1\%$ 以内。MS 和 NMR 用于结构确证。安全数据：

- 可能引起皮肤和眼睛刺激
- 吸入或误食可能造成呼吸道和消化道损伤
- 操作时应配备通风设备
- 废弃物需按危险化学品规范处置

建议在专业化学通风橱中操作，并备有 MSDS 以备应急参考。