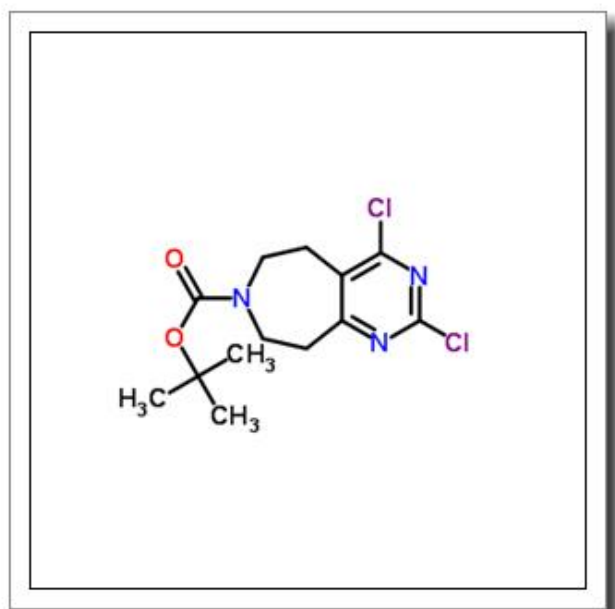


2,4-二氯-5,6,8,9-四氢嘧啶并[4,5-d]氮杂卓-7-羧酸叔丁酯

tert-Butyl 2,4-dichloro-5,6,8,9-tetrahydropyrimido-[4,5-d]azepine-7-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-Butyl 2,4-dichloro-5,6,8,9-tetrahydropyrimido-[4,5-d]azepine-7-carboxylate
中文名称	2,4-二氯-5,6,8,9-四氢嘧啶并[4,5-d]氮杂卓-7-羧酸叔丁酯
CAS 号	1065114-27-3
分子式	C ₁₃ H ₁₇ Cl ₂ N ₃ O ₂
分子量	318.199
纯度	≥96%

产品说明

2,4-二氯-5,6,8,9-四氢嘧啶并[4,5-d]氮杂卓-7-羧酸叔丁酯 (CAS 号: 1065114-27-3) 是一种具有重要生物活性的杂环化合物, 其分子式为 $C_{13}H_{17}Cl_2N_3O_2$, 分子量为 318.199。该化合物以白色至类白色固体形式存在, 纯度不低于 96%, 属于嘧啶并氮杂卓类衍生物, 其结构中的二氯取代基和叔丁酯基团赋予其独特的化学性质, 适用于多种有机合成与药物研发场景。

1. 产品概述与化学特性

该化合物是一种高纯度中间体, 其核心结构包含嘧啶并氮杂卓骨架, 具有较高的化学稳定性和反应活性。分子中的氯原子可作为亲电反应位点, 而叔丁酯基团则提供了后续脱保护或进一步修饰的灵活性。其溶解性表现为易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇, 微溶于水, 需在干燥条件下保存以避免水解。

2. 生物化学功能与重要性

作为嘧啶类衍生物, 该化合物在药物化学中常用于激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体 (GPCR) 调节剂的合成前体。其结构特征使其能够与生物体内的靶标蛋白结合, 干扰特定信号通路, 因此在抗肿瘤、抗炎及神经退行性疾病药物研发中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于医药研发领域, 具体用途包括:

- 作为关键中间体用于合成小分子靶向药物, 尤其是蛋白激酶抑制剂。
- 在组合化学中用于构建杂环化合物库, 支持高通量筛选。
- 用于研究细胞凋亡或增殖相关机制的工具化合物开发。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、干燥、避光条件下保存, 长期储存需充入惰性气体保护。使用时需在干燥环境中操作, 避免与强氧化剂或酸碱物质接触。溶解建议使用无水 DMSO, 配制溶液后建议分装并尽快使用, 避免反复冻融。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确保纯度 $\geq 96\%$ ，并提供完整的质谱 (MS) 和核磁共振 (NMR) 数据支持。安全信息提示：该化合物可能对眼睛、皮肤及呼吸系统造成刺激，操作时应穿戴防护手套、护目镜及防尘口罩，并在通风橱中进行。如意外接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地化学品管理法规。

本产品仅供科研用途，不适用于人体或临床诊断。使用者应具备专业化学知识并遵守实验室安全规范。