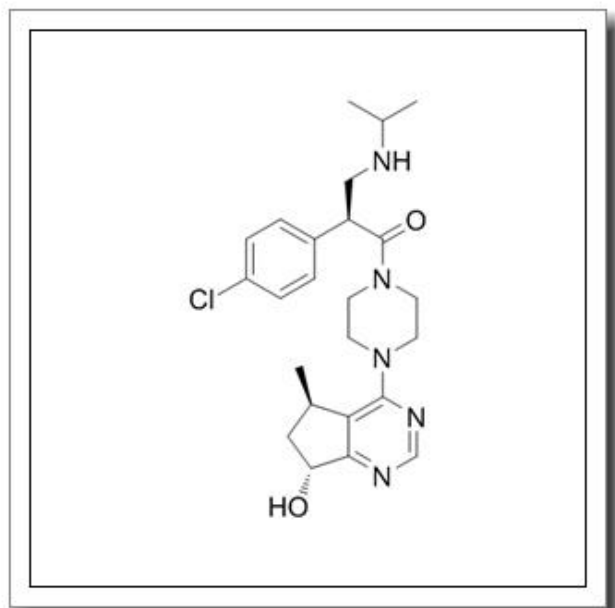


# (2S)-2-(4-氯苯基)-1-[4-[(5R,7R)-6,7-二氢-7-羟基-5-甲基-5H-环戊并嘧啶-4-基]-1-哌嗪基]-3-[(1-甲基乙基)氨基]-1-丙酮

*(2S)-2-(4-chlorophenyl)-1-[4-[(5R,7R)-7-hydroxy-5-methyl-6,7-dihydro-5H-cyclopenta[d]pyrimidin-4-yl]piperazin-1-yl]-3-(propan-2-ylamino)propan-1-one*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	(2S)-2-(4-chlorophenyl)-1-[4-[(5R,7R)-7-hydroxy-5-methyl-6,7-dihydro-5H-cyclopenta[d]pyrimidin-4-yl]piperazin-1-yl]-3-(propan-2-ylamino)propan-1-one
中文名称	(2S)-2-(4-氯苯基)-1-[4-[(5R,7R)-6,7-二氢-7-羟基-5-甲基-5H-环戊并嘧

	啶-4-基]-1-哌嗪基]-3-[(1-甲基乙基)氨基]-1-丙酮
CAS 号	1001264-89-6
分子式	C <sub>24</sub> H <sub>32</sub> C <sub>1</sub> N <sub>5</sub> O <sub>2</sub>
分子量	457.996
纯度	≥96%

## 产品说明

(2S)-2-(4-氯苯基)-1-[4-[(5R,7R)-6,7-二氢-7-羟基-5-甲基-5H-环戊并嘧啶-4-基]-1-哌嗪基]-3-[(1-甲基乙基)氨基]-1-丙酮产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

本产品是一种具有复杂立体结构的有机化合物，化学名称为(2S)-2-(4-氯苯基)-1-[4-[(5R,7R)-7-羟基-5-甲基-6,7-二氢-5H-环戊并[d]嘧啶-4-基]哌嗪-1-基]-3-(异丙氨基)丙烷-1-酮，CAS 号为 1001264-89-6。其分子式为 C<sub>24</sub>H<sub>32</sub>C<sub>1</sub>N<sub>5</sub>O<sub>2</sub>，分子量为 457.996，纯度 ≥96%。该化合物包含氯苯基、哌嗪环、环戊并嘧啶及异丙氨基等官能团，表现出特定的手性特征（2S, 5R, 7R 构型），这些结构特征与其生物活性密切相关。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物可能作为激酶抑制剂或信号通路调节剂发挥作用，其环戊并嘧啶核心结构与 ATP 竞争性抑制剂的药效团类似，而哌嗪基团可增强分子与靶蛋白的结合能力。7 位羟基和手性中心的存在可能影响其与受体的立体选择性相互作用，在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

目前主要应用于医药研发领域，作为候选药物分子或药理工具化合物，用于以下方向：

- 激酶相关疾病（如肿瘤、炎症）的机制研究
- 结构-活性关系（SAR）研究的参照物
- 新型小分子抑制剂的先导化合物优化

### 4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光保存，置于干燥惰性气体环境中。开封后需充氮密封，防止吸湿和氧化。使用时需在干燥环境下操作，建议使用手套箱或惰性气体保护。溶解性测试表明可溶于 DMSO、甲醇等有机溶剂，水溶性较差，配制溶液时需预实验确定最佳溶剂体系。

## 5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 验证纯度  $\geq 96\%$ ，质谱和核磁共振确认结构。该化合物可能存在刺激性，操作时应穿戴防护装备（手套、护目镜、实验服），避免吸入或皮肤接触。MSDS 数据显示其属于有害化学品，需在通风橱中处理，废弃物按危险化学品规范处置。具体毒理学数据尚不完整，建议遵循 ALARP（合理可行最低风险）原则使用。