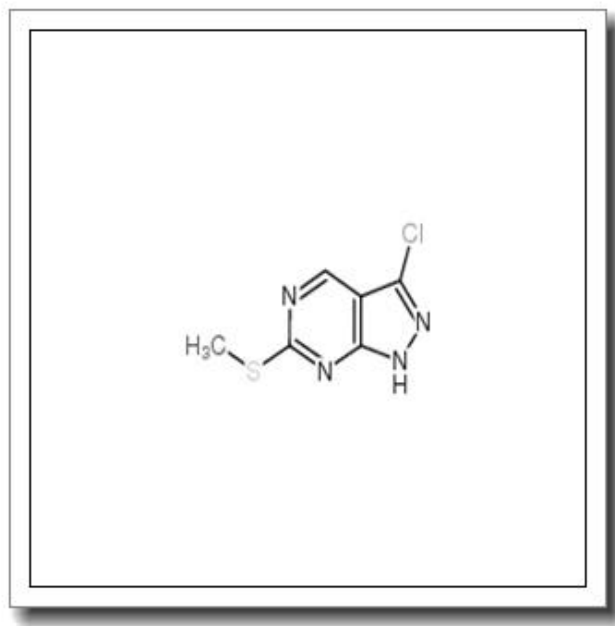


3-氯-6-(甲硫基)-1H-吡唑并[3,4-d]嘧啶

3-chloro-6-methylsulfanyl-2H-pyrazolo[3,4-d]pyrimidine



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-chloro-6-methylsulfanyl-2H-pyrazolo[3,4-d]pyrimidine
中文名称	3-氯-6-(甲硫基)-1H-吡唑并[3,4-d]嘧啶
CAS 号	100859-88-9
分子式	C6H5ClN4S
分子量	200.649
纯度	≥ 96%

产品说明

3-氯-6-(甲硫基)-1H-吡唑并[3,4-d]嘧啶产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至淡黄色结晶性粉末，化学名称为 3-chloro-6-methylsulfanyl-2H-pyrazolo[3,4-d]pyrimidine，分子式 C₆H₅ClN₄S，分子量 200.649，CAS 号 100859-88-9。其结构中含吡唑并嘧啶骨架，兼具氯代和甲硫基修饰，赋予其独特的电子效应和空间位阻特性。该化合物在常温下稳定，易溶于二甲基亚砜（DMSO）和甲醇，微溶于水，需避光保存以避免光解反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为嘌呤类似物衍生物，本产品可通过竞争性抑制嘌呤代谢酶干扰核苷酸合成，在生物体系中表现出显著的抗增殖活性。其甲硫基侧链可增强细胞膜穿透性，而氯原子则提供活性位点共价修饰潜力，使其成为激酶抑制剂和抗肿瘤药物开发的关键中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

在药物研发领域，本品常用于构建 CDK2、EGFR 等激酶抑制剂的母核结构，适用于抗肿瘤及抗炎药物先导化合物筛选。农业化学中可作为植物生长调节剂的合成前体。此外，在生化研究中用于探针分子设计，通过硫醚键进一步功能化修饰。

4. 储存条件与使用建议

建议长期储存于-20℃惰性气体（如氩气）环境中，短期使用可存放于 2-8℃干燥器内。开封后需充氮密封，避免反复冻融。实验操作应在通风橱中进行，使用丁腈手套防护。溶解时优先选用 DMSO 配制储备液（建议浓度 10 mM），工作液需现配现用。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%（面积归一化法），残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。MSDS 数据显示其急性毒性类别为 4 级（LD₅₀ > 500 mg/kg），但可能引起眼睛和皮肤刺激。废弃处理需遵循危险化学品处置规范，建议通过专业机构焚烧降解。

注：具体实验方案请结合目标体系优化参数，建议首次使用者进行小剂量预实验评估反应活性。