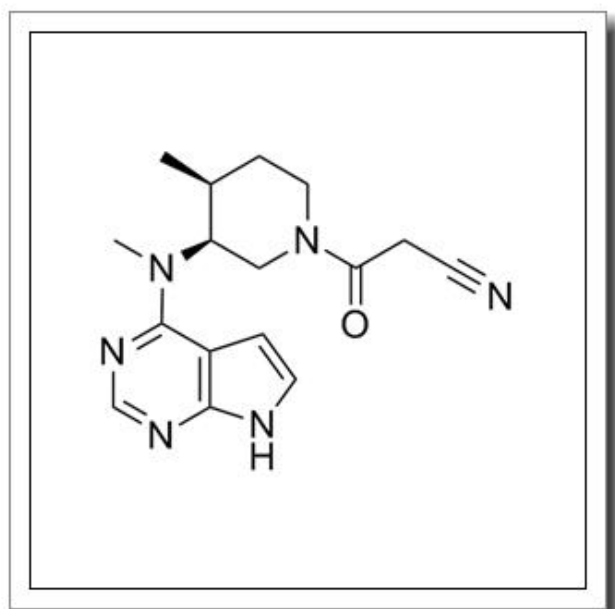


(3S,4S)-4-甲基-3-(甲基-7H-吡咯并[2,3-D]嘧啶-4-氨基)-BETA-氧代-1-哌啶丙腈

3-[(3S, 4S)-4-methyl-3-[methyl (7H-pyrrolo[2, 3-d]pyrimidin-4-yl)amino]piperidin-1-yl]-3-oxopropanenitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-[(3S, 4S)-4-methyl-3-[methyl (7H-pyrrolo[2, 3-d]pyrimidin-4-yl)amino]piperidin-1-yl]-3-oxopropanenitrile
中文名称	(3S, 4S)-4-甲基-3-(甲基-7H-吡咯并[2, 3-D]嘧啶-4-氨基)-BETA-氧代-1-哌啶丙腈
CAS 号	1092578-47-6
分子式	C ₁₆ H ₂₀ N ₆ O
分子量	312.37
纯度	≥96%

产品说明

3-[(3S, 4S)-4-methyl-3-[methyl (7H-pyrrolo[2, 3-d]pyrimidin-4-yl)amino]piperidin-1-yl]-3-oxopropanenitrile 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品是一种高纯度有机化合物，化学名称为(3S, 4S)-4-甲基-3-(甲基-7H-吡咯并[2, 3-D]嘧啶-4-氨基)-BETA-氧代-1-哌啶丙腈，CAS 号为 1092578-47-6。其分子式为 C₁₆H₂₀N₆O，分子量为 312.37，纯度 ≥96%。该化合物具有特定的立体构型

(3S, 4S)，结构中含有哌啶环、吡咯并嘧啶基团以及丙腈侧链，这些特征使其在生物活性分子设计中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是一种小分子抑制剂，可通过靶向特定激酶或蛋白质相互作用干扰细胞信号通路。其吡咯并嘧啶结构能够模拟嘌呤碱基，竞争性结合 ATP 位点，从而表现出潜在的抗增殖或抗炎活性。这类结构类似物在药物研发领域常用于先导化合物优化，尤其在肿瘤学和免疫学相关研究中具有广泛的应用前景。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发和生物化学研究领域。具体用途包括：作为激酶抑制剂的候选分子用于体外酶活性测试；在细胞实验中评估其对特定通路（如 JAK/STAT 或 PI3K/AKT）的调控作用；作为结构修饰的中间体用于衍生化反应。此外，它还可用于药物代谢与药代动力学（DMPK）研究中的标准品或对照品。

4. 储存条件与使用建议

建议在-20℃下避光干燥储存，长期保存需置于惰性气体（如氩气）环境中。开封后应避免反复冻融，建议分装使用。使用时需在干燥惰性氛围（如手套箱）中操作，溶解推荐使用 DMSO 或乙醇等有机溶剂，配制溶液后建议短期内使用完毕。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 验证纯度 ≥96%，MS 和 NMR 谱图确认结构。操作时需穿戴防护装备（手套、护目镜及实验服），避免吸入粉尘或接触皮肤。其急性毒性数据尚未完全

明确，建议按潜在有害化学品处理。废弃物处置需符合当地环保法规，不可直接排入下水道。

注：本说明仅提供基础信息，具体实验方案需结合文献及实际需求设计。