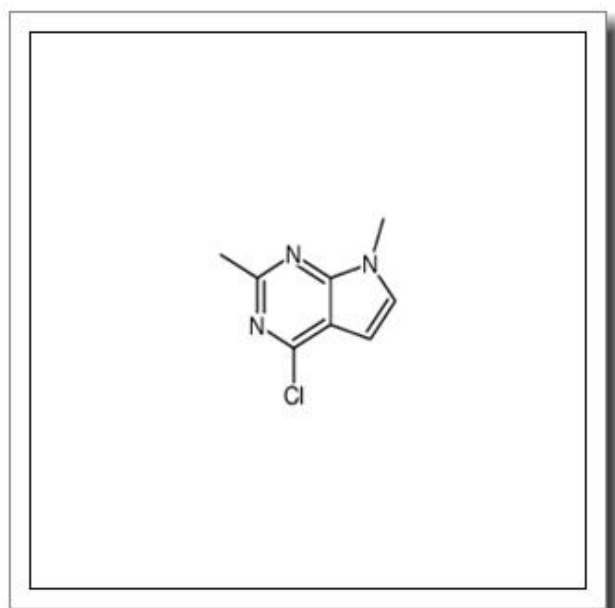


4-chloro-2,7-dimethyl-7H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidine

4-chloro-2,7-dimethyl-7H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidine



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-chloro-2,7-dimethyl-7H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidine
中文名称	4-chloro-2,7-dimethyl-7H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidine
CAS 号	78756-80-6
分子式	C ₈ H ₈ ClN ₃
分子量	181.622
纯度	≥96%

产品说明

4-氯-2,7-二甲基-7H-吡咯并[2,3-d]嘧啶产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶粉末，化学名称为 4-氯-2,7-二甲基-7H-吡咯并[2,3-d]嘧啶，CAS 号为 78756-80-6，分子式为 C₈H₈ClN₃，分子量为 181.622。其结构属于吡咯并嘧啶类化合物，具有芳香杂环特性，氯原子和甲基的引入显著影响其电子分布和反应活性。纯度标准 ≥96% (HPLC 测定)，常见杂质为同系物或未反应中间体。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为嘧啶衍生物，可通过干扰核苷酸代谢途径发挥生物活性。其吡咯并嘧啶骨架是多种激酶抑制剂的药效团核心结构，在调控细胞信号转导中具有潜在价值。氯原子的存在增强了其作为亲电试剂的反应能力，使其成为合成更复杂生物活性分子的关键中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域，本品主要用于构建抗肿瘤和抗病毒药物的先导化合物，特别是用于蛋白激酶抑制剂（如 JAK/STAT 通路抑制剂）的结构修饰。在材料科学中，可作为有机发光二极管（OLED）的电子传输层材料前体。实验室中常用于研究嘌呤类似物的构效关系，或作为荧光标记物的合成原料。

4. 储存条件与使用建议

需密封保存于 -20℃ 至 4℃ 的干燥环境中，避免光照和湿度超过 60%。开封后建议充氮保护，并于 6 个月内使用完毕。溶解时优先选用无水 DMSO 或 DMF，水溶液需现配现用。操作时应佩戴防护手套和护目镜，通风橱中进行称量。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 和质谱三重验证，批号关联完整分析证书。急性毒性数据（大鼠口服 LD₅₀）为 1250 mg/kg，属于刺激性化学品，接触皮肤后需立即用大量清水

冲洗。废弃处置应遵循危险化学品管理条例，不可直接排入下水系统。运输分类为 UN2811 6.1 类，需贴注“有害物质”标识。

（注：实际应用前请务必查阅最新版物质安全数据表 MSDS）