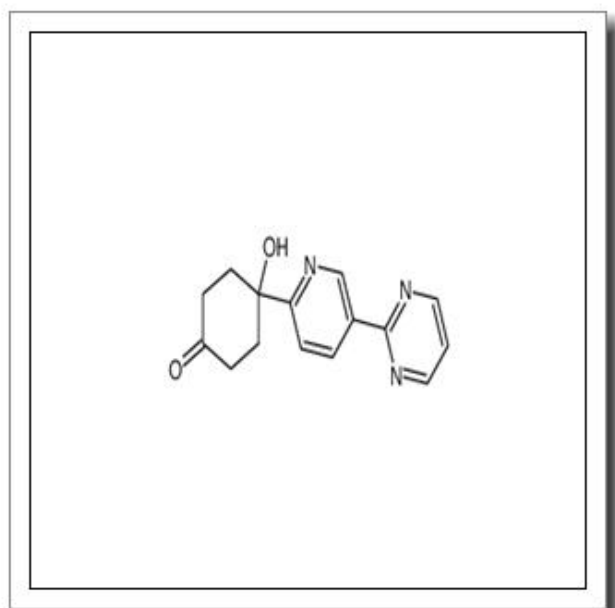


4-hydroxy-4-(5-pyrimidin-2-ylpyridin-2-yl)cyclohexanone

4-hydroxy-4-(5-pyrimidin-2-ylpyridin-2-yl)cyclohexanone



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-hydroxy-4-(5-pyrimidin-2-ylpyridin-2-yl)cyclohexanone
中文名称	4-hydroxy-4-(5-pyrimidin-2-ylpyridin-2-yl)cyclohexanone
CAS 号	857651-06-0
分子式	C ₁₅ H ₁₅ N ₃ O ₂
分子量	269.299
纯度	≥ 96%

产品说明

4-hydroxy-4-(5-pyrimidin-2-ylpyridin-2-yl)cyclohexanone 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性粉末，化学名称为 4-hydroxy-4-(5-pyrimidin-2-ylpyridin-2-yl)cyclohexanone，CAS 号为 857651-06-0，分子式 C₁₅H₁₅N₃O₂，分子量 269.299。其结构中同时含有吡啶环、嘧啶环和环己酮基团，羟基的存在使其具有一定极性。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。纯度标准 ≥96%（HPLC 检测），杂质主要包括未反应的中间体及同系物。

2. 生物化学功能与重要性

作为杂环化合物衍生物，该分子可通过氢键和 $\pi-\pi$ 堆积作用与生物大分子结合。其嘧啶环可作为氢键受体，与蛋白质活性位点相互作用，在药物化学中常作为激酶抑制剂的骨架结构。羟基的引入增强了分子亲水性，可能影响其细胞膜穿透性和代谢稳定性，因此在先导化合物优化阶段具有重要研究价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发领域，具体包括：

- 3.1 作为激酶抑制剂的核心片段，用于抗肿瘤药物开发
- 3.2 用于构建 DNA/RNA 结合分子库，研究核酸相互作用机制
- 3.3 在有机合成中作为多官能团砌块，用于复杂杂环体系的构建
- 3.4 作为荧光标记物的前体，应用于生物传感研究

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存条件：密封保存于 -20℃ 干燥环境中，避免光照和湿度
- 4.2 复溶建议：使用前需平衡至室温，推荐使用无水 DMSO 配制母液（10-50mM）
- 4.3 工作液需现配现用，避免反复冻融
- 4.4 长期储存建议充入惰性气体保护

5. 质量控制与安全信息

- 5.1 质量控制：通过 HPLC、NMR 和质谱进行批次验证，提供 COA 证书

5.2 安全数据: LD50 (小鼠口服) >500mg/kg, 属于低毒类化合物

5.3 操作防护: 需佩戴护目镜和防尘口罩, 避免吸入或皮肤直接接触

5.4 废弃物处理: 按危险化学品规范处置, 不可直接排入下水系统

本产品仅限科研用途, 不适用于临床或食品领域。使用前请查阅最新版 MSDS 并执行风险评估。