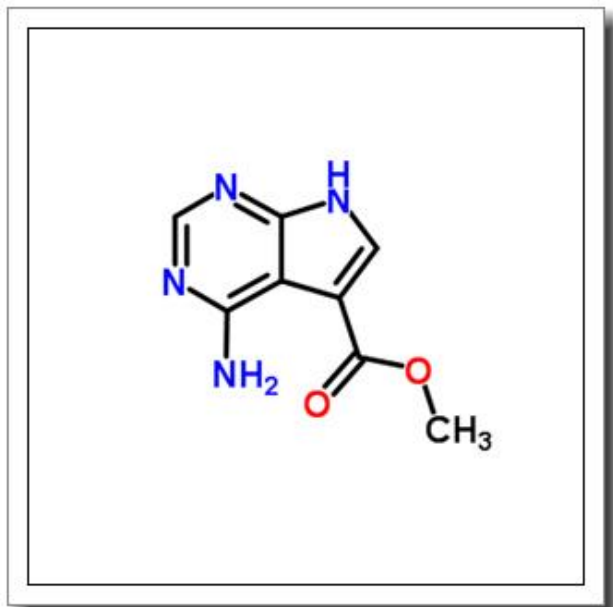


4-氨基-7H-吡咯并[2,3-d]嘧啶-5-甲酸甲酯

Methyl 4-amino-7H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidine-5-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 4-amino-7H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidine-5-carboxylate
中文名称	4-氨基-7H-吡咯并[2,3-d]嘧啶-5-甲酸甲酯
CAS 号	126149-77-7
分子式	C ₈ H ₈ N ₄ O ₂
分子量	192.175
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为 4-氨基-7H-吡咯并[2,3-d]嘧啶-5-甲酸甲酯 (Methyl 4-amino-7H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidine-5-carboxylate), CAS 号 126149-77-7, 分子式 C₈H₈N₄O₂, 分子量 192.175, 纯度 ≥96%。该化合物属于吡咯并嘧啶类衍生物, 结构中含有氨基和甲酯基团, 兼具嘧啶环的碱性与酯基的反应活性。常温下为白色至类白色结晶或粉末, 可溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇等, 微溶于水。其化学性质稳定, 但在强酸、强碱或高温条件下可能发生水解或降解。

2. 生物化学功能与重要性

作为嘌呤类似物, 该化合物可通过竞争性抑制参与核酸代谢的酶类 (如激酶或甲基转移酶), 干扰 DNA/RNA 合成途径。其核心结构吡咯并嘧啶是多种生物活性分子的药效团, 在核苷类药物的设计与开发中具有重要价值。此外, 氨基与酯基的修饰位点使其成为合成更复杂杂环化合物的关键中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药研发与生物化学研究领域。具体用途包括:

1. 作为抗肿瘤或抗病毒核苷类药物的合成前体
2. 用于激酶抑制剂或表观遗传调控剂的构效关系研究
3. 在有机合成中作为构建块, 制备功能化杂环化合物
4. 作为荧光标记物或探针的修饰基团

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于-20℃干燥环境中, 避免光照与潮湿。开封后需充入惰性气体保护, 以延长稳定性。使用时应佩戴防护手套、护目镜, 在通风橱中操作。溶解时优先选用无水 DMSO, 配制的工作液建议现配现用, 避免反复冻融。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, MS 与 NMR 验证结构。潜在危害包括:

1. 皮肤接触可能引起刺激性反应

2. 吸入粉尘可能导致呼吸道不适

3. 对环境水生生物具有潜在毒性

废弃物需按危险化学品规范处置。安全数据表 (SDS) 可应要求提供, 实验操作需符合 GLP 标准。