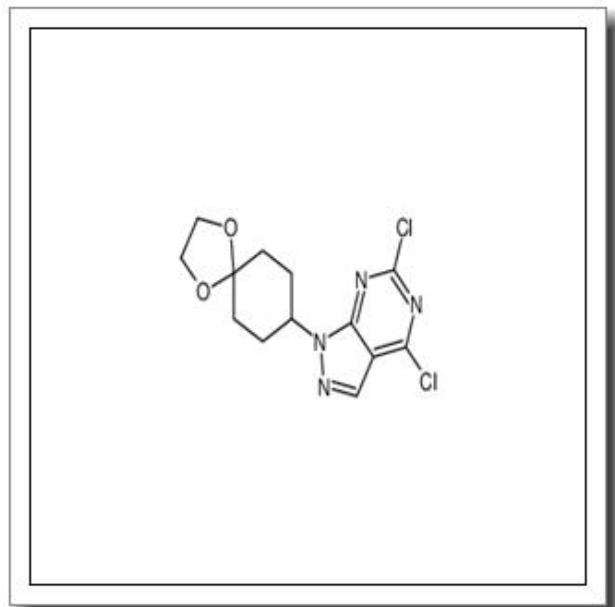


# 4,6-二氯-1-(1,4-二噁螺[4.5]-8-癸基)- 1H-吡唑并[3,4-D]嘧啶

*4,6-dichloro-1-(1,4-dioxaspiro[4.5]decan-8-yl)pyrazolo[3,4-d]pyrimidine*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	4,6-dichloro-1-(1,4-dioxaspiro[4.5]decan-8-yl)pyrazolo[3,4-d]pyrimidine
中文名称	4,6-二氯-1-(1,4-二噁螺[4.5]-8-癸基)-1H-吡唑并[3,4-D]嘧啶
CAS 号	1144080-31-8
分子式	C <sub>13</sub> H <sub>14</sub> Cl <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>
分子量	329.182
纯度	≥96%

## 产品说明

### 4,6-二氯-1-(1,4-二噁螺[4.5]-8-癸基)-1H-吡唑并[3,4-D]嘧啶产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 4,6-dichloro-1-(1,4-dioxaspiro[4.5]decan-8-yl)pyrazolo[3,4-d]pyrimidine，CAS 号为 1144080-31-8，分子式 C<sub>13</sub>H<sub>14</sub>Cl<sub>2</sub>N<sub>4</sub>O<sub>2</sub>，分子量 329.182。其结构中包含吡唑并嘧啶核心与螺环二氧戊烷基团，赋予其独特的空间位阻和电子效应。纯度 ≥96% (HPLC)，溶解性测试显示易溶于 DMSO、DMF 等极性有机溶剂，微溶于水。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为嘌呤类似物衍生物，可通过竞争性抑制参与核苷酸代谢的酶类（如激酶或磷酸二酯酶），干扰 DNA/RNA 合成途径。其螺环结构增强了细胞膜穿透性，而二氯取代基则显著提升与靶标蛋白的结合亲和力，在信号转导研究中具有重要价值。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药研发：用于激酶抑制剂类抗肿瘤药物的先导化合物优化，尤其在 CDK、JAK 等靶点研究中表现活跃。
- 3.2 生化探针：标记后可作为分子探针，用于蛋白质相互作用或酶活性检测实验。
- 3.3 农药开发：其杂环结构对害虫几丁质合成酶具有潜在抑制作用，可用于新型杀虫剂开发。

#### 4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存：密封避光保存于 -20℃ 干燥环境中，长期储存建议充入惰性气体。
- 4.2 稳定性：在 pH 6-8 缓冲液中 72 小时内保持稳定，避免与强氧化剂接触。
- 4.3 操作：建议在通风橱中称量，佩戴防尘口罩及丁腈手套。

#### 5. 质量控制与安全信息

- 5.1 质检标准：通过 HPLC (C18 柱，乙腈/水梯度洗脱) 和质谱联用技术确保纯度。

5.2 安全数据: 急性毒性 (LD50 大鼠口服) >500 mg/kg, 皮肤刺激性类别 3。

5.3 废弃物处理: 需按危险有机卤化物规范处置, 不可直接排入下水道。

本产品仅供科研用途, 不适用于临床或食品领域。具体实验方案建议参考文献报道的浓度范围 (通常为 10-100  $\mu\text{M}$ )。