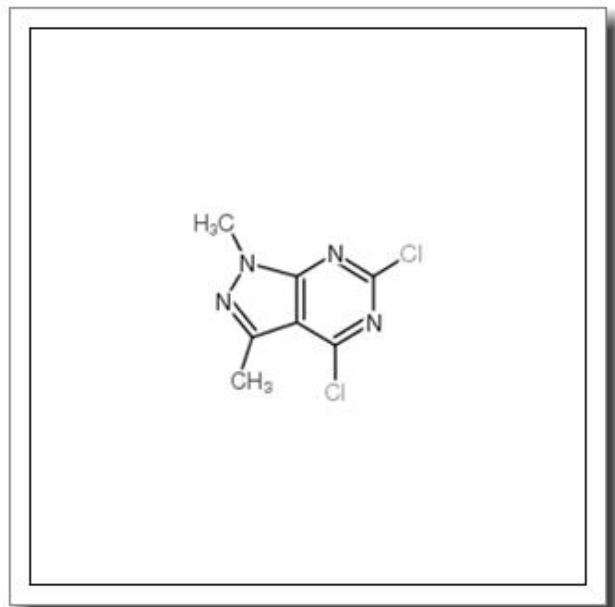


4,6-二氯-1,3-二甲基-1H-吡唑并[3,4-d]嘧啶

4,6-Dichloro-1,3-dimethyl-1H-pyrazolo[3,4-d]pyrimidine



产品基本信息

属性	值
化学名称	4,6-Dichloro-1,3-dimethyl-1H-pyrazolo[3,4-d]pyrimidine
中文名称	4,6-二氯-1,3-二甲基-1H-吡唑并[3,4-d]嘧啶
CAS 号	1072895-86-3
分子式	C ₇ H ₆ Cl ₂ N ₄
分子量	217.055
纯度	≥96%

产品说明

4,6-二氯-1,3-二甲基-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-1,3-dimethyl-1H-pyrazolo[3,4-d]pyrimidine，CAS 号 1072895-86-3，分子式 C₇H₆Cl₂N₄，分子量 217.055。其结构中包含吡唑并嘧啶骨架和两个活性氯原子，赋予其高反应性。纯度 ≥96% (HPLC)，易溶于有机溶剂如 DMSO 和甲醇，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是重要的医药中间体，其吡唑并嘧啶核心结构可选择性抑制蛋白激酶活性，在信号转导研究中具有关键作用。氯原子的存在使其易于通过亲核取代反应进一步衍生化，常用于构建靶向抗肿瘤或抗炎药物的先导化合物。

3. 主要应用领域与具体用途

在药物研发领域，本品常用于合成 JAK 激酶抑制剂和 BTK 抑制剂的关键中间体。此外，可作为荧光探针修饰基团或核酸类似物研究的原料。具体应用包括：1) 小分子抗肿瘤药物的结构优化；2) 激酶选择性研究的工具分子；3) 生物共轭反应的活性连接子。

4. 储存条件与使用建议

建议密闭保存于 -20℃ 干燥环境中，避免光照和湿度。开封后需充惰性气体保护。使用时应佩戴防护手套和护目镜，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

本产品经 HPLC 和 NMR 双重验证，符合细胞级实验标准。MSDS 数据显示其属于刺激性化学品，皮肤接触可能引起红肿，操作后需彻底清洗。废弃物应按危险化学品规范处置。运输分类为 UN2811，需附带化学品安全技术说明书。

注：具体实验方案需根据实际研究目的优化，建议参考文献报道的合成与药理活性研究方法。