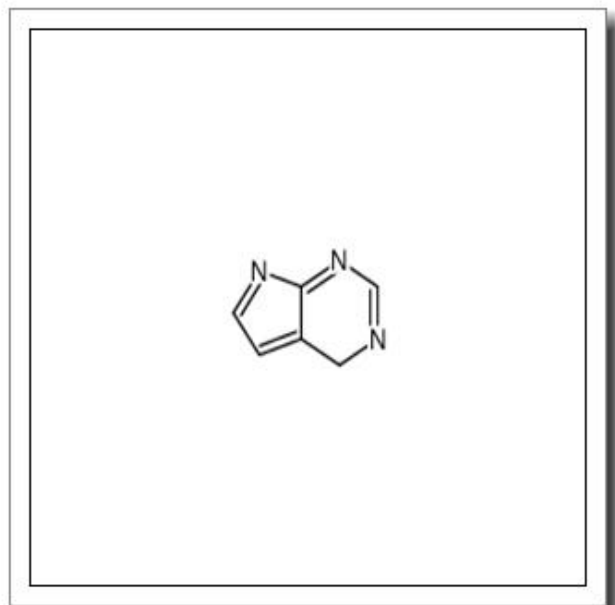


4H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidine

4H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidine



产品基本信息

属性	值
化学名称	4H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidine
中文名称	4H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidine
CAS 号	271-68-1
分子式	C ₆ H ₅ N ₃
分子量	119.124
纯度	≥96%

产品说明

4H-吡咯并[2,3-d]嘧啶产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4H-吡咯并[2,3-d]嘧啶 (CAS 号: 271-68-1) 是一种含氮杂环化合物, 分子式为 $C_6H_5N_3$, 分子量 119.124。该化合物由吡咯环与嘧啶环稠合而成, 属于嘌呤类衍生物的重要结构单元。其纯度 $\geq 96\%$, 外观通常为白色至类白色结晶粉末, 可溶于有机溶剂如 DMSO 和甲醇, 微溶于水。该结构具有显著的芳香性和平面性, 是药物化学中常见的药效团骨架。

2. 生物化学功能与重要性

作为嘌呤类似物, 4H-吡咯并[2,3-d]嘧啶可通过竞争性抑制参与核酸代谢的酶类 (如激酶或聚合酶), 干扰 DNA/RNA 合成。其结构修饰后可衍生为多种生物活性分子, 包括抗病毒、抗肿瘤和抗炎化合物的核心片段。在核苷类药物的研发中, 该骨架常用于模拟天然嘌呤碱基, 以增强靶标结合能力或代谢稳定性。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发和有机合成领域。在药物化学中, 它是构建激酶抑制剂 (如 JAK 抑制剂) 和抗癌剂 (如嘌呤拮抗剂) 的关键中间体。此外, 在材料科学中可用于合成荧光标记物或配体设计。具体应用包括: 核苷类似物合成、高通量筛选化合物库构建、以及酶机制研究中的探针分子制备。

4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光条件下密封保存, 长期储存需置于 $-20^{\circ}C$ 惰性气体 (如氩气) 环境中。开封后需避免反复冻融, 防止吸湿降解。实验操作应在通风橱中进行, 佩戴防护手套和护目镜。溶解时建议先用少量 DMSO 助溶, 再稀释至所需浓度。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 批次特异性核磁共振 (NMR) 与质谱 (MS) 数据可随 COA 提供。安全警示: 可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激, 操作时需遵守 GHS

分类（H302-H315-H319）。如接触皮肤，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地危险化学品管理法规。

——本说明基于现有科学数据编制，具体应用需结合实验条件优化——