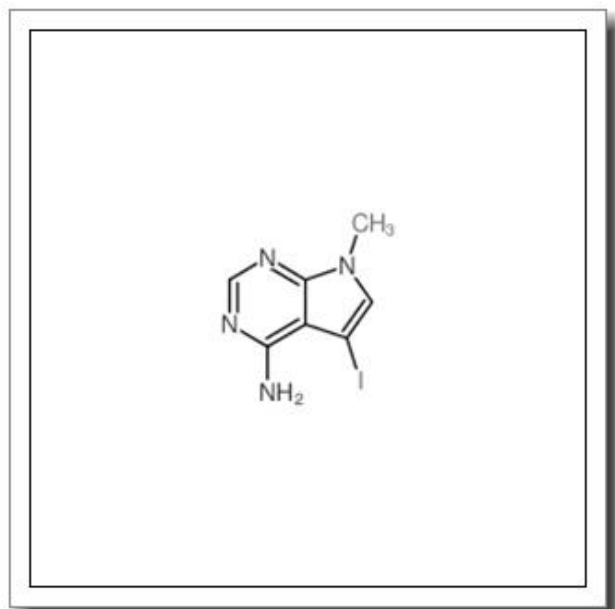


5-碘-7-甲基-7h-吡咯并[2,3-d]嘧啶-4-胺

5-iodo-7-methylpyrrolo[2,3-d]pyrimidin-4-amine



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-iodo-7-methylpyrrolo[2,3-d]pyrimidin-4-amine
中文名称	5-碘-7-甲基-7h-吡咯并[2,3-d]嘧啶-4-胺
CAS 号	862729-13-3
分子式	C7H7IN4
分子量	274.062
纯度	≥96%

产品说明

5-碘-7-甲基-7H-吡咯并[2,3-d]嘧啶-4-胺产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶粉末，化学名称为 5-iodo-7-methylpyrrolo[2,3-d]pyrimidin-4-amine，CAS 号 862729-13-3，分子式 C₇H₇IN₄，分子量 274.062。其结构特征为吡咯并嘧啶骨架，含碘取代基和氨基官能团，纯度 ≥96%（HPLC 测定）。该化合物在常温下稳定，微溶于水，易溶于 DMSO、DMF 等有机溶剂，需避光保存以避免碘键光解。

2. 生物化学功能与重要性

作为嘌呤类似物衍生物，该分子可通过竞争性抑制参与核苷酸代谢的关键酶（如激酶或甲基转移酶），干扰 DNA/RNA 合成。其碘原子的引入增强了分子极性和空间位阻，显著提升与靶标蛋白的结合特异性，在激酶抑制剂开发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

3.1 医药研发：用于构建 EGFR、ALK 等酪氨酸激酶抑制剂的先导化合物，尤其在非小细胞肺癌靶向药物研究中应用广泛。

3.2 分子探针：碘原子可作为放射性标记位点（如 ¹²⁵I 标记），用于药物代谢追踪或受体结合实验。

3.3 有机合成：作为多功能中间体，参与 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等交叉偶联反应。

4. 储存条件与使用建议

4.1 储存：密封保存于 -20℃ 惰性环境（氩气或氮气保护），避免反复冻融。

4.2 溶解：推荐使用预冷 DMSO 配制 10 mM 母液，现配现用。

4.3 防护：操作时需佩戴防尘口罩、丁腈手套及护目镜，确保通风良好。

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）、质谱及 ¹H NMR 三重验证。

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: 需按危险化学品规范处置, 建议采用活性炭吸附后交由专业机构处理。

本产品仅限科研用途, 不适用于临床或食品领域。具体实验方案建议参考文献或咨询专业技术支持。