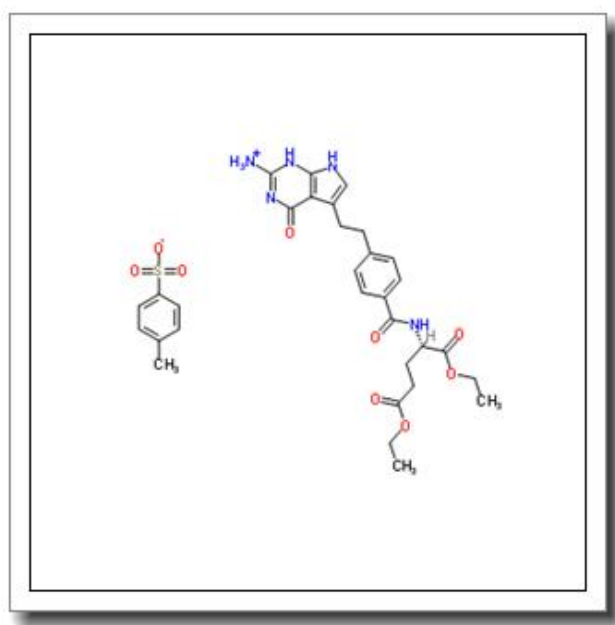


# N-[4-[2-(2-氨基-4,7-二氢-4-氧代-1H-吡咯并[2,3-d]嘧啶-5-基)乙基]苯甲酰]-L-谷氨酸二乙酯对甲苯磺酸盐

*diethyl (2S)-2-[[4-[2-(2-amino-4-oxo-1,7-dihydropyrrolo[2,3-d]pyrimidin-5-yl)ethyl]benzoyl]amino]pentanedioate, 4-methylbenzenesulfonic acid*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	diethyl (2S)-2-[[4-[2-(2-amino-4-oxo-1,7-dihydropyrrolo[2,3-d]pyrimidin-5-yl)ethyl]benzoyl]amino]pentanedioate, 4-methylbenzenesulfonic acid
中文名称	N-[4-[2-(2-氨基-4,7-二氢-4-氧代-1H-吡咯并[2,3-d]嘧啶-5-基)乙基]苯甲酰]-L-谷氨酸二乙酯对甲苯磺酸盐
CAS 号	165049-28-5
分子式	C31H37N5O9S
分子量	655.719

纯度	$\geq 96\%$
----	-------------

## 产品说明

### 产品说明

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 diethyl (2S)-2-[[4-[2-(2-amino-4-oxo-1,7-dihydropyrrolo[2,3-d]pyrimidin-5-yl)ethyl]benzoyl]amino]pentanedioate, 4-methylbenzenesulfonic acid, 中文名称为 N-[4-[2-(2-氨基-4,7-二氢-4-氧代-1H-吡咯并[2,3-d]嘧啶-5-基)乙基]苯甲酰]-L-谷氨酸二乙酯对甲苯磺酸盐, CAS 号为 165049-28-5。其分子式为 C<sub>31</sub>H<sub>37</sub>N<sub>5</sub>O<sub>9</sub>S, 分子量为 655.719, 纯度 ≥96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 易溶于极性有机溶剂 (如 DMSO、甲醇), 微溶于水, 具有明确的立体构型和稳定的化学性质。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物是一种重要的叶酸类似物衍生物, 其结构中的吡咯并嘧啶核心与谷氨酸二乙酯片段赋予其独特的生物活性。它可作为二氢叶酸还原酶 (DHFR) 的潜在抑制剂, 干扰叶酸代谢途径, 从而影响核苷酸合成和细胞增殖。在生物医学研究中, 该分子常用于探索抗肿瘤和免疫调节机制, 尤其在靶向叶酸依赖性代谢通路的研究中具有重要价值。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发和生物化学研究领域, 具体包括:

- 作为抗肿瘤药物开发的先导化合物, 用于评估其对癌细胞增殖的抑制作用。
- 用于叶酸代谢通路相关酶的功能研究, 如 DHFR 酶活性测定。
- 在免疫学研究中, 探索其对 T 细胞或 B 细胞功能的调控潜力。
- 作为化学标准品, 用于 HPLC 或质谱分析方法的建立与验证。

#### 4. 储存条件与使用建议

为确保产品稳定性, 建议在 -20℃ 下避光干燥储存, 长期保存需置于惰性气体 (如氮气) 环境中。使用时需平衡至室温并避免反复冻融。溶解推荐使用 DMSO 或乙

醇，配制溶液后建议分装保存并于短期内使用。操作时需佩戴防护手套、口罩及护目镜，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ ，并提供完整的 COA（质量分析证书）。其安全性信息如下：

- 可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性，操作应在通风橱中进行。
- 避免与强氧化剂接触，以防分解或反应。
- 废弃物需按危险化学品规范处置。

如需进一步毒理学数据或实验方案支持，请联系专业技术团队获取。