

# 产品\_1135

*methyl 7H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidine-5-carboxylate*

产品图片未找到

## 产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 7H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidine-5-carboxylate
中文名称	产品_1135
CAS 号	1234615-76-9
分子式	C8H7N3O2
分子量	177.16
纯度	≥ 96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

甲基 7H-吡咯并[2,3-d]嘧啶-5-羧酸酯 (产品\_1135) 是一种高纯度有机化合物, 化学式为 C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>N<sub>3</sub>O<sub>2</sub>, 分子量为 177.16, CAS 号为 1234615-76-9。该化合物为白色至类白色结晶粉末, 纯度 ≥96%, 属于吡咯并嘧啶类衍生物, 具有稳定的芳香杂环结构。其酯化官能团 (羧酸甲酯) 和嘧啶环体系赋予其良好的溶解性和反应活性, 适合作为医药中间体或生化研究试剂。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物是嘌呤类似物的结构变体, 可通过干扰核酸代谢发挥生物活性。其嘧啶环可作为氢键受体或供体参与分子识别, 而酯基则便于进一步衍生化。在药物研发中, 此类结构常作为激酶抑制剂或抗肿瘤药物的核心骨架, 具有调控细胞信号通路的潜力。

### 3. 主要应用领域与具体用途

产品\_1135 主要应用于以下领域:

- 医药中间体: 用于合成靶向抗癌药物 (如 JAK 抑制剂) 及抗病毒化合物。
- 生化研究: 作为酶底物或抑制剂, 研究嘌呤代谢相关通路。
- 材料科学: 作为有机半导体材料的合成前体。

典型用途包括体外实验中的分子构建块, 或通过水解、胺解等反应制备羧酸/酰胺衍生物。

### 4. 储存条件与使用建议

建议在 -20°C、干燥避光条件下密封保存, 长期储存需充惰性气体保护。使用时需在干燥环境中操作, 避免接触水分。溶解性测试表明其易溶于 DMSO、DMF 等极性有机溶剂, 水溶性较低 (<0.1 mg/mL), 建议先用有机溶剂助溶再稀释至工作浓度。

### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, 批次间一致性误差 <2%。MS 和 NMR 谱图数据可提供验证。安全注意事项:

- 穿戴防护手套/眼镜，避免吸入粉尘或皮肤直接接触。
- 如遇泄漏，用惰性吸附材料处理并通风。
- 废弃物应作为有害化学品处置，遵守当地法规。

毒性数据（参考类别）：急性口服毒性（LD50 大鼠）>500 mg/kg，建议在通风橱中操作。

（注：实际应用前请查阅最新版物质安全数据表 MSDS 并开展小试验证。）