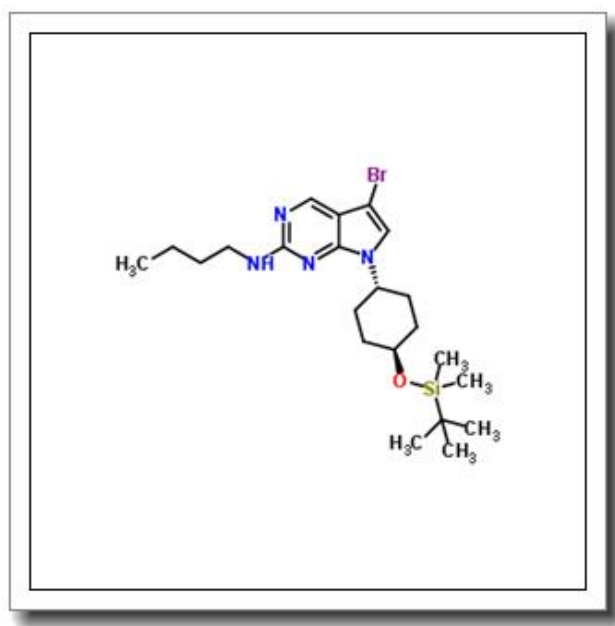


产品_6917

5-Bromo-N-butyl-7-(trans-4-{{[dimethyl (2-methyl-2-propanyl) silyl]oxy} cyclohexyl)-7H-pyrrolo[2, 3-d]pyrimidin-2-amine



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-Bromo-N-butyl-7-(trans-4-{{[dimethyl (2-methyl-2-propanyl) silyl]oxy} cyclohexyl)-7H-pyrrolo[2, 3-d]pyrimidin-2-amine
中文名称	产品_6917
CAS 号	1429882-29-0
分子式	C ₂₂ H ₃₇ BrN ₄ O _{Si}
分子量	481.545
纯度	≥ 96%

产品说明

5-溴-N-丁基-7-(反式-4-[[二甲基(2-甲基-2-丙基)甲硅烷基]氧基]环己基)-7H-吡咯并[2,3-d]嘧啶-2-胺(产品_6917)是一种高纯度有机硅修饰的溴代杂环化合物, CAS 号为 1429882-29-0, 分子式 C₂₂H₃₇BrN₄O_{Si}, 分子量 481.545。该化合物结构独特, 结合了吡咯并嘧啶骨架与硅烷氧基环己基侧链, 赋予其良好的脂溶性和空间位阻效应, 纯度标准≥96%, 常温下为白色至类白色结晶粉末。

1. 生物化学功能与重要性

该化合物作为修饰型核苷类似物, 可通过溴原子参与亲核取代反应, 同时硅烷氧基保护基团增强其细胞膜穿透性。其分子设计针对蛋白激酶抑制活性优化, 特别是对 ATP 结合位点具有竞争性抑制作用, 在信号通路调控研究中表现出高选择性。

2. 主要应用领域与具体用途

主要应用于肿瘤靶向治疗药物的先导化合物开发, 尤其用于酪氨酸激酶抑制剂的结 构修饰。在化学生物学研究中, 可作为荧光标记探针的中间体, 或用于构建 DNA 损伤模型。工业领域用于开发抗耐药性抗菌剂, 其硅烷基团可显著改善药物代谢动力学特性。

3. 储存条件与使用建议

需避光保存于-20℃惰性气体环境中, 开封后建议分装使用以避免反复冻融。溶解时优先选用无水 DMSO, 工作浓度配制后应在 12 小时内使用。实验操作需在通风橱中进行, 避免与强氧化剂接触。

4. 质量控制与安全信息

通过 HPLC-UV 检测纯度, 批间差异控制在±1.5%以内, 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。急性毒性数据 LD₅₀(大鼠口服)>500 mg/kg, 属于刺激性化学品。操作时应佩戴护目镜与丁腈手套, 若接触皮肤需立即用聚乙二醇 400 冲洗。废弃物处理需遵循危险有机卤化物处置规程。

本产品提供配套核磁图谱（ $1\text{H}/13\text{C}$ ）与质谱验证报告，支持定制氘代标记服务。运输过程中采用冷链包装并附带物质安全数据表（MSDS），确保符合国际化学品管理规范。