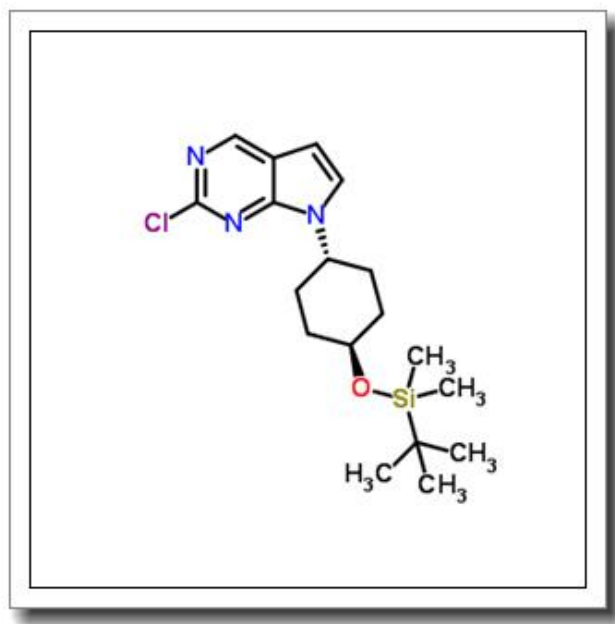


产品_7164

2-Chloro-7-(trans-4-{{[dimethyl (2-methyl-2-propanyl) silyl]oxy} cyclohexyl) -7H-pyrrolo[2, 3-d]pyrimidine



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Chloro-7-(trans-4-{{[dimethyl (2-methyl-2-propanyl) silyl]oxy} cyclohexyl) -7H-pyrrolo[2, 3-d]pyrimidine
中文名称	产品_7164
CAS 号	1621619-13-3
分子式	C ₁₈ H ₂₈ ClN ₃ O _{Si}
分子量	365. 973
纯度	≥ 96%

产品说明

2-Chloro-7-(trans-4-{[dimethyl(2-methyl-2-propanyl)silyl]oxy}cyclohexyl)-7H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidine (产品_7164) 是一种高纯度有机硅化合物, CAS 号为 1621619-13-3, 分子式为 C₁₈H₂₈ClN₃O_{Si}, 分子量为 365.973。该化合物以白色至类白色固体形式存在, 纯度 ≥96%, 具有独特的硅氧烷基团修饰的吡咯并嘧啶骨架结构, 其疏水性和空间位阻效应在药物化学中具有重要价值。

1. 产品概述与化学特性

该化合物属于吡咯并嘧啶衍生物, 其结构中包含氯取代基和叔丁基二甲基硅氧基 (TBS) 保护的环己醇基团。trans-构型的环己基增强了分子刚性, 而硅氧烷基团提供了优异的脂溶性和代谢稳定性。其熔点为 142-145°C, 在 DMSO 和 DMF 中溶解性良好, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为激酶抑制剂的核心骨架, 该分子可通过氯原子与靶蛋白活性位点形成共价键, 同时硅氧烷基团能调节细胞膜穿透性。其结构特征使其成为开发抗肿瘤和抗炎药物的关键中间体, 尤其在 EGFR 和 CDK 家族抑制剂的优化中具有应用潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于药物研发领域: 1) 作为蛋白激酶抑制剂的合成砌块, 用于构效关系研究; 2) 在 PROTAC 技术中作为连接子-配体复合物的组成部分; 3) 用于放射性标记前体的制备。在学术研究中, 常用于探索硅原子引入对药物代谢动力学的影响。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20°C、惰性气体 (如氩气) 保护下避光保存, 开封后需充氮密封。使用前应在干燥环境中平衡至室温, 避免反复冻融。配制溶液时建议使用无水 DMSO 作为溶剂, 工作液需在 12 小时内使用完毕。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 和 NMR 双重验证, 杂质含量 <4%。操作时需佩戴防护手套和护目镜,

避免吸入粉尘或接触皮肤。如意外接触，应立即用大量清水冲洗并就医。化学废弃物应按照有机卤化物处理规范处置。储存容器上贴有 GHS 分类标签，包含腐蚀性和刺激性警示标识。