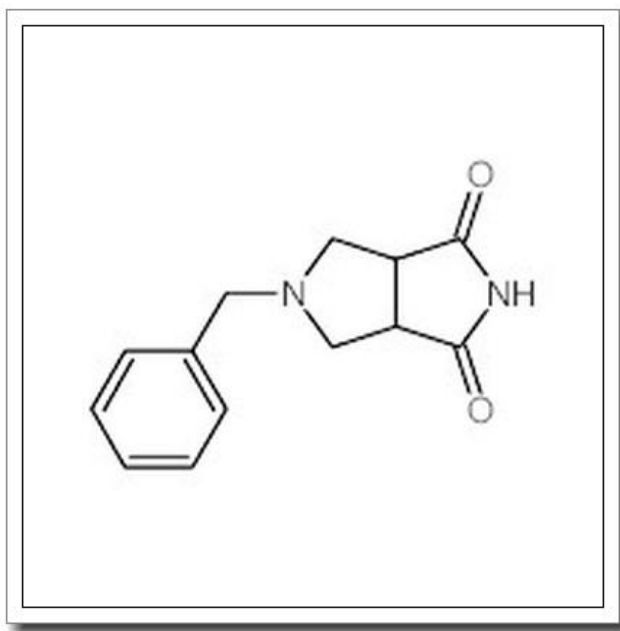


5-苄基四氢吡咯并[3,4-c]吡咯-1,3(2H,3ah)-二酮

5-benzyl-3a, 4, 6, 6a-tetrahydropyrrolo[3, 4-c]pyrrole-1, 3-dione



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-benzyl-3a, 4, 6, 6a-tetrahydropyrrolo[3, 4-c]pyrrole-1, 3-dione
中文名称	5-苄基四氢吡咯并[3, 4-c]吡咯-1, 3(2H, 3ah)-二酮
CAS 号	848591-86-6
分子式	C ₁₃ H ₁₄ N ₂ O ₂
分子量	230. 262
纯度	>96%

产品说明

5-苄基四氢吡咯并[3,4-c]吡咯-1,3(2H,3aH)-二酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 5-benzyl-3a,4,6,6a-tetrahydropyrrolo[3,4-c]pyrrole-1,3-dione, CAS 号为 848591-86-6, 分子式为 C₁₃H₁₄N₂O₂, 分子量为 230.262。该化合物属于吡咯并吡咯二酮类衍生物, 具有稠合双环结构, 苄基取代基赋予其独特的空间位阻和疏水性。常温下为白色至类白色结晶粉末, 纯度经 HPLC 验证 ≥96%, 符合生化试剂标准。

2. 生物化学功能与重要性

该分子结构中二酮官能团可作为氢键受体, 与生物大分子产生特异性相互作用。其刚性双环骨架常被用作药物设计中的核心 scaffold, 在激酶抑制剂和 G 蛋白偶联受体调节剂的开发中具有潜在价值。研究表明, 该类化合物可能通过干扰蛋白质-蛋白质相互作用参与细胞信号转导调控。

3. 主要应用领域与具体用途

作为关键医药中间体, 主要用于以下领域:

- 新型抗肿瘤药物先导化合物的结构修饰
- 神经退行性疾病相关靶点分子的合成
- 有机发光材料 (OLED) 的电子传输层组分

实验室级应用包括:

- 体外酶活性抑制实验的阳性对照品
- 分子探针的合成前体
- 不对称催化反应的手性模板

4. 储存条件与使用建议

长期储存需置于 -20℃、惰性气体保护下, 短期使用可存放于 2-8℃ 干燥器。开封后建议分装充氮保存, 避免反复冻融。溶解性测试显示: DMSO 中溶解度 >

50mg/mL，水溶液中需加入 10%助溶剂（如 β -环糊精）。实验操作应在通风橱中进行，避免直接接触皮肤。

5. 质量控制与安全信息

批次质检报告包含：

- 核磁共振氢谱（ ^1H NMR）验证结构
- 质谱（MS）确认分子量
- 残留溶剂检测（GC）符合 USP 标准

安全数据：

- 危险代码 Xi（刺激性物质）
- 个人防护需穿戴实验服、护目镜及丁腈手套
- 泄露处理应使用吸附材料收集，避免扬尘
- 废弃物处置依照当地有机化学品处理法规

本产品仅限科研用途，不适用于诊断或治疗用途。具体应用方案建议参考文献方法或咨询专业技术支持。