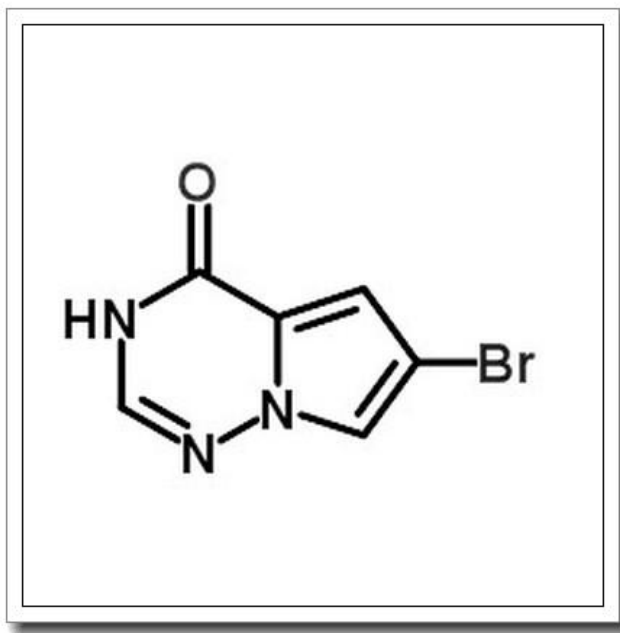


6-溴吡咯并[2,1-f][1,2,4]噻嗪-4(3h)-酮

6-Bromopyrrolo[2,1-f][1,2,4]triazin-4(3H)-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	6-Bromopyrrolo[2,1-f][1,2,4]triazin-4(3H)-one
中文名称	6-溴吡咯并[2,1-f][1,2,4]噻嗪-4(3h)-酮
CAS 号	888721-83-3
分子式	C ₆ H ₄ BrN ₃ O
分子量	214.02
纯度	>96%

产品说明

6-溴吡咯并[2,1-f][1,2,4]噻嗪-4(3H)-酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

6-溴吡咯并[2,1-f][1,2,4]噻嗪-4(3H)-酮 (CAS 号: 888721-83-3) 是一种杂环有机化合物, 分子式为 $C_6H_4BrN_3O$, 分子量为 214.02。该化合物属于吡咯并三嗪酮衍生物, 结构中含有一个溴原子取代基, 赋予其独特的反应活性。其纯度超过 96%, 外观通常为白色至类白色结晶粉末。该物质在常温下稳定, 但需避免强氧化剂和强酸强碱环境。

2. 生物化学功能与重要性

作为杂环化合物, 该分子在药物化学和材料科学中具有重要价值。其核心结构吡咯并三嗪酮是多种生物活性分子的骨架, 能够参与氢键形成和 $\pi-\pi$ 堆积相互作用。溴原子的引入增强了其作为中间体的反应性, 使其在 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等交叉偶联反应中具有广泛应用潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要应用于医药研发和有机合成领域。在药物化学中, 它是构建激酶抑制剂、抗病毒剂和抗癌先导化合物的关键中间体。在材料科学中, 可用于合成有机光电材料或配体设计。具体用途包括但不限于: 作为蛋白质激酶抑制剂的合成前体、核酸类似物修饰的起始原料, 以及金属有机框架 (MOF) 材料的配体修饰。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光密封保存, 长期储存需充入惰性气体保护。开封后应在干燥环境中尽快使用, 避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、N,N-二甲基甲酰胺 (DMF), 微溶于甲醇和乙醇, 不溶于水。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 批次间差异控制在 $\pm 1\%$ 以内。MS 和 NMR 谱图数据可随货提供。根据 GHS 分类, 该物质可能造成皮肤刺激 (H315) 和严重眼睛刺激

(H319)。操作时应避免吸入粉尘，如接触皮肤需立即用大量清水冲洗。废弃物处理需符合当地危险化学品管理条例。

注：本产品仅限科研用途，不可用于人体或动物实验。具体应用前请查阅最新文献并开展小规模预实验验证。