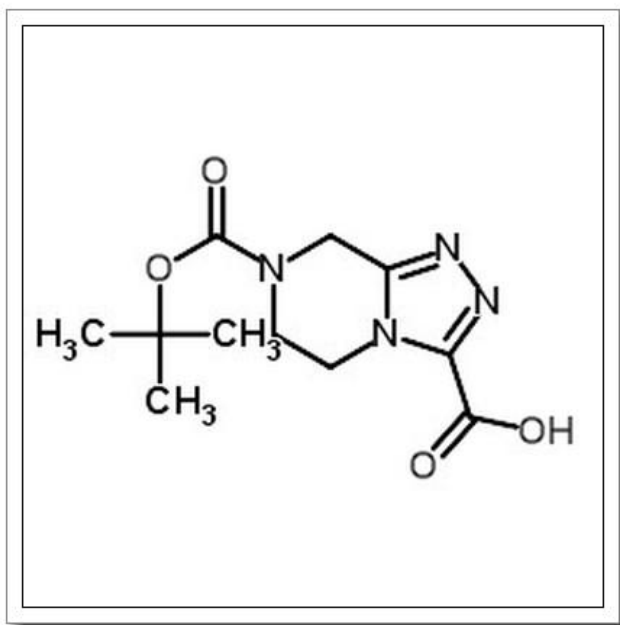


7-(叔丁氧基羰基)-5,6,7,8-四氢-[1,2,4]噻唑并[4,3-a]吡嗪-3-羧酸

7-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]-6,8-dihydro-5H-[1,2,4]triazolo[4,3-a]pyrazine-3-carboxylic acid



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|--|
| 化学名称 | 7-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]-6,8-dihydro-5H-[1,2,4]triazolo[4,3-a]pyrazine-3-carboxylic acid |
| 中文名称 | 7-(叔丁氧基羰基)-5,6,7,8-四氢-[1,2,4]噻唑并[4,3-a]吡嗪-3-羧酸 |
| CAS 号 | 1053656-19-1 |
| 分子式 | C ₁₁ H ₁₆ N ₄ O ₄ |
| 分子量 | 268.269 |
| 纯度 | >96% |

产品说明

7-(叔丁氧基羰基)-5,6,7,8-四氢-[1,2,4]噻唑并[4,3-a]吡嗪-3-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 7-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]-6,8-dihydro-5H-[1,2,4]triazolo[4,3-a]pyrazine-3-carboxylic acid, CAS 号 1053656-19-1。其分子式为 C₁₁H₁₆N₄O₄，分子量 268.269，纯度经 HPLC 检测 ≥96%。该化合物属于杂环羧酸衍生物，结构中同时含有三唑并吡嗪骨架和叔丁氧羰基保护基团，在极性有机溶剂如 DMSO、甲醇中具有良好溶解性，水溶性中等。

2. 生物化学功能与重要性

作为三唑并吡嗪类化合物的关键中间体，其分子中的羧酸基团和叔丁氧羰基 (Boc) 保护基赋予其特殊的反应活性。Boc 基团在酸性条件下可选择性脱除，而三唑环结构能与多种生物靶点相互作用，使其成为构建蛋白酶抑制剂、激酶调节剂等生物活性分子的重要砌块。该结构单元在药物化学中广泛应用于构效关系研究和先导化合物优化。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域：

- 3.1 医药研发：作为抗肿瘤、抗病毒药物（如 HCV 蛋白酶抑制剂）的核心中间体
- 3.2 农药化学：用于合成具有杀虫、杀菌活性的杂环化合物
- 3.3 材料科学：作为配体参与金属有机框架材料的构建
- 3.4 学术研究：用于有机合成方法学开发及生物正交反应研究

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20℃ 干燥避光条件下长期储存，开封后需充氮气保护。使用前需平衡至室温并避免反复冻融。溶解时推荐先用 DMSO 配制成母液，再稀释至工作浓度。实验操作应在通风橱中进行，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 和质谱三重验证，符合生化试剂标准。MSDS 数据显示其急性毒性为 LD₅₀>500 mg/kg（大鼠经口），但仍需按有害化学品规范处理。操作时需佩戴防护眼镜、丁腈手套和实验服，如接触皮肤应立即用大量清水冲洗。废弃物应作为有机危险废物处置，禁止直接排入下水系统。

注：具体实验方案建议参考文献报道方法，并根据实际需求优化反应条件。