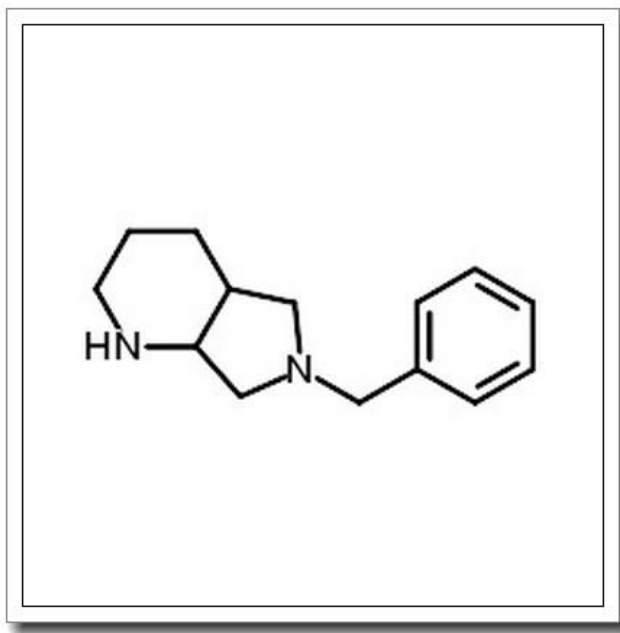


# 苄基-11 氢吡咯并[3,4-B]吡啶

*6-Benzyl-octahydropyrrolo[3,4-b]pyridine*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	6-Benzyl-octahydropyrrolo[3,4-b]pyridine
中文名称	苄基-11 氢吡咯并[3,4-B]吡啶
CAS 号	128740-14-7
分子式	C <sub>14</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub>
分子量	216.322
纯度	>96%

## 产品说明

### 6-苄基-八氢吡咯并[3,4-b]吡啶产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 6-Benzyl-octahydropyrrolo[3,4-b]pyridine (CAS 128740-14-7)，中文别名苄基-11 氢吡咯并[3,4-B]吡啶，是一种具有稠合双环结构的含氮杂环化合物。其分子式为 C<sub>14</sub>H<sub>20</sub>N<sub>2</sub>，分子量 216.322，纯度 ≥96%，常温下表现为白色至类白色结晶或粉末。该化合物同时具备吡咯烷与哌啶环的立体构型特征，苄基取代基赋予其疏水性，使其在有机溶剂（如甲醇、DMSO）中具有良好溶解性，而在水中溶解度较低。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为吡咯并吡啶类衍生物，该结构单元广泛存在于生物活性分子中，可通过氮原子配位或氢键相互作用参与酶抑制、受体调节等过程。其刚性双环骨架常被用作药物化学中的优势片段，特别在神经系统靶点（如  $\sigma$  受体、多巴胺受体）和抗肿瘤化合物设计中具有重要价值。高纯度 (>96%) 产品可确保其在结构-活性关系 (SAR) 研究中的可靠性。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域：

- (1) 医药研发：作为中间体用于合成神经精神类药物（如抗抑郁剂、镇痛剂）及抗癌先导化合物；
- (2) 生化工具：用于构建荧光探针或光亲和标记物的核心骨架；
- (3) 材料科学：作为配体参与金属有机框架 (MOF) 材料的合成。实验建议工作浓度为 1-10 mM (DMSO 配制)，具体用量需根据实验体系优化。

#### 4. 储存条件与使用建议

长期储存需置于 -20℃、避光、干燥环境中，开封后建议充氮保护。常温运输可稳定保存 72 小时。使用时需注意：

- 溶解性测试表明其在 DMSO 中溶解度 >50 mg/mL，建议优先选用 DMSO 作为溶剂母

液;

- 避免与强氧化剂接触, 操作时需在通风橱中进行;
- 水溶液体系需现配现用, 防止长时间放置导致水解。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 归一化法检测纯度 $\geq 96\%$ , 批次间差异 $< 2\%$ 。MS 与  $^1\text{H}$  NMR 谱图数据可随 COA 提供。安全数据如下:

- GHS 分类: 刺激性物质 (Category 2), 吞咽有害 (Category 4);
- 防护措施: 佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套;
- 应急处理: 皮肤接触时立即用肥皂水冲洗 15 分钟, 误食需就医并携带产品标签。

(注: 本说明基于现有研究数据编制, 实际应用前请查阅最新文献并开展预实验验证。)