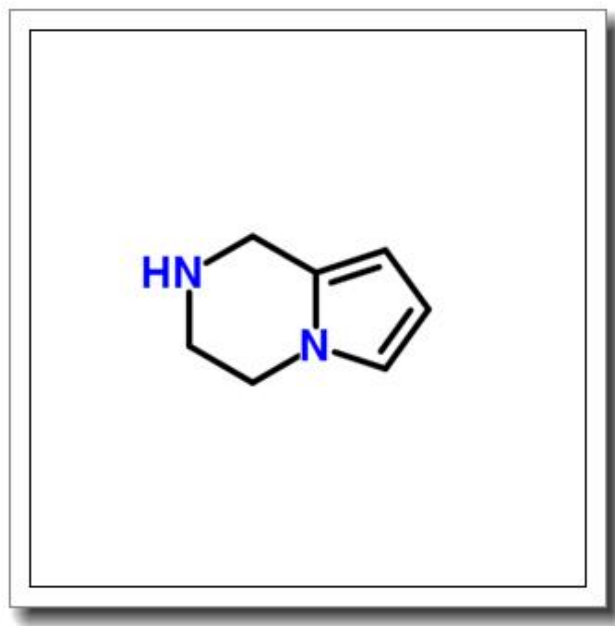


1,2,3,4-四氢吡咯并[1,2-a]吡嗪

1, 2, 3, 4-Tetrahydropyrrolo[1, 2-a]pyrazine



产品基本信息

属性	值
化学名称	1, 2, 3, 4-Tetrahydropyrrolo[1, 2-a]pyrazine
中文名称	1, 2, 3, 4-四氢吡咯并[1, 2-a]吡嗪
CAS 号	71257-38-0
分子式	C ₇ H ₁₀ N ₂
分子量	122.168
纯度	≥96%

产品说明

1, 2, 3, 4-四氢吡咯并[1, 2-a]吡嗪产品说明书

1. 产品概述与化学特性

1, 2, 3, 4-四氢吡咯并[1, 2-a]吡嗪 (CAS 号: 71257-38-0) 是一种杂环有机化合物, 分子式为 $C_7H_{10}N_2$, 分子量为 122.168。该化合物由吡咯与吡嗪环稠合而成, 含部分氢化结构, 常温下为白色至淡黄色结晶或粉末, 纯度 $\geq 96\%$ 。其独特的双环体系赋予其良好的溶解性 (溶于常见有机溶剂如乙醇、DMSO) 和稳定性, 是构建复杂生物活性分子的重要中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氮杂环化合物, 该分子可通过氢键和 $\pi - \pi$ 堆积作用与生物靶标结合, 在药物化学中常用于修饰先导化合物的药效团。其结构中的叔胺氮原子可参与质子化, 影响跨膜渗透性, 而刚性骨架有助于优化构效关系。在天然产物全合成中, 该结构单元常见于抗菌和抗肿瘤活性分子的核心片段。

3. 主要应用领域与具体用途

医药研发领域: 用于合成 GPCR 靶向药物、激酶抑制剂及神经调节剂, 尤其适用于中枢神经系统药物开发。

材料科学: 作为配体参与金属有机框架 (MOF) 材料的构建, 或用于光电功能材料的改性。

农业化学: 衍生化为新型杀虫剂或植物生长调节剂的中间体。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 置于 -20°C 干燥避光环境, 惰性气体保护可延长稳定性。开封后建议分装使用, 避免反复冻融。实验操作需在通风橱中进行, 佩戴防护手套及护目镜。溶解时优先选用氮气保护的干燥溶剂, 避免与强氧化剂接触。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度, 批次间差异 $\leq 1\%$ 。核磁共振 ($^1\text{H}/^{13}\text{C}$ NMR) 和质谱 (MS) 确保结构确证。

安全警示: 该化合物可能引起皮肤和眼睛刺激, 吸入或误食需立即就医 (提供 SDS 完整文档)。废弃物应按危险化学品规范处置。运输分类为 UN2811, 包装等级 III。

(注: 本说明基于现有研究数据, 实际应用前请进行充分验证。更新日期: 2023 年)