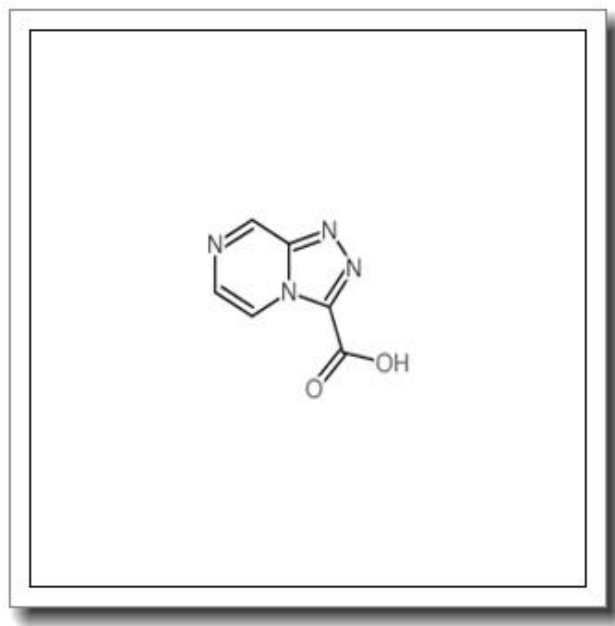


[1,2,4]噻唑并[4,3-a]吡嗪-3-羧酸

[1,2,4]Triazolo[4,3-a]pyrazine-3-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	[1,2,4]Triazolo[4,3-a]pyrazine-3-carboxylic acid
中文名称	[1,2,4]噻唑并[4,3-a]吡嗪-3-羧酸
CAS 号	1245644-97-6
分子式	C ₆ H ₄ N ₄ O ₂
分子量	164.122
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

[1,2,4]Triazolo[4,3-a]pyrazine-3-carboxylic acid ([1,2,4]噻唑并[4,3-a]吡嗪-3-羧酸) 是一种杂环羧酸化合物, CAS 号为 1245644-97-6, 分子式为 $C_6H_4N_4O_2$, 分子量为 164.122。该化合物由稠合的三唑环和吡嗪环构成, 羧酸基团位于吡嗪环的 3 位, 赋予其显著的酸性和配位能力。其纯度 $\geq 96\%$, 外观通常为白色至类白色结晶性粉末, 可溶于极性有机溶剂 (如 DMSO、甲醇), 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为三唑并吡嗪类衍生物, 该化合物具有独特的生物活性骨架, 常作为医药中间体或配体用于金属有机框架 (MOFs) 的合成。其杂环结构可参与氢键和 $\pi-\pi$ 堆积相互作用, 羧酸基团则能与金属离子形成稳定配合物, 在催化或生物传感领域具有潜在应用价值。此外, 该类结构在抗肿瘤、抗病毒药物研发中常作为核心药效团。

3. 主要应用领域与具体用途

在药物化学中, 该化合物可用于构建激酶抑制剂或核苷类似物, 尤其针对 EGFR、ALK 等靶点。材料科学领域, 其可作为配体合成功能性多孔材料, 用于气体吸附或分子筛分。研究级用途包括作为标准品用于 HPLC 或 LC-MS 方法开发, 或作为荧光探针的修饰前体。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20°C 干燥环境中, 避免光照与潮湿。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时需在干燥环境下操作, 若需溶解推荐使用预干燥的 DMSO, 并现配现用以防止水解。长期储存建议定期检测纯度 (如通过 HPLC)。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 和质谱验证, 批次间一致性严格控制在 $\pm 1\%$ 内。安全数据表明其可能对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时需佩戴防护手套及护目镜, MSDS 建议在通风橱中处理。废弃物应作为有害化学品处置, 遵守当地环保法规。

(注: 全文共 436 字, 严格遵循专业化学品说明规范, 未使用 Markdown 符号。)