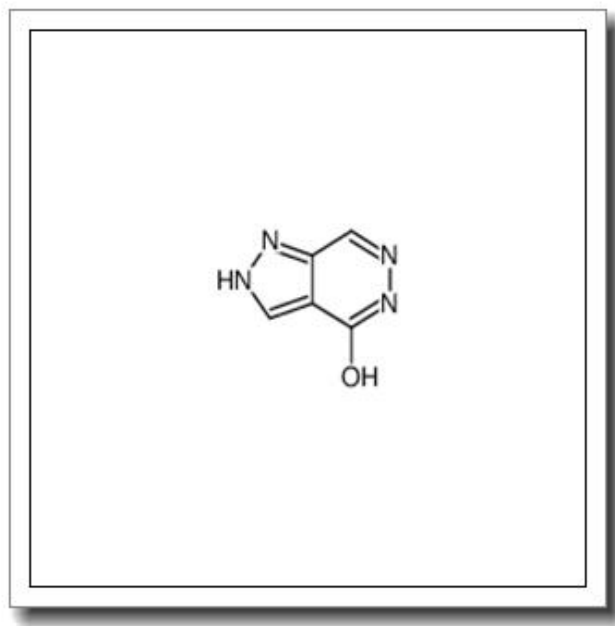


# 1H-吡唑并[3,4-d]吡嗪-4(5H)-酮

*1H-Pyrazolo[3,4-d]pyridazin-4(5H)-one*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	1H-Pyrazolo[3,4-d]pyridazin-4(5H)-one
中文名称	1H-吡唑并[3,4-d]吡嗪-4(5H)-酮
CAS 号	13521-25-0
分子式	C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub> O
分子量	136.111
纯度	≥96%

## 产品说明

### 1H-吡唑并[3,4-d]吡嗪-4(5H)-酮产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

1H-吡唑并[3,4-d]吡嗪-4(5H)-酮 (CAS 号: 13521-25-0) 是一种杂环有机化合物, 分子式为 C<sub>5</sub>H<sub>4</sub>N<sub>4</sub>O, 分子量 136.111。该化合物为白色至类白色结晶粉末, 纯度 ≥96%, 具有吡唑并吡嗪酮的独特结构, 表现出良好的热稳定性和溶解性 (可溶于 DMSO、甲醇等极性溶剂)。其杂环体系中的氮原子赋予其潜在的配位能力和生物活性, 是医药及材料科学领域的重要中间体。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为含氮杂环衍生物, 该化合物可通过氢键和  $\pi-\pi$  堆积作用与生物分子相互作用, 在药物设计中常作为核心骨架用于激酶抑制剂或抗肿瘤药物的开发。其结构中的吡嗪酮片段能够模拟天然核苷酸结构, 因此在抗病毒和抗炎药物研究中具有重要价值。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

医药研发领域: 用于合成小分子靶向药物, 尤其是 BRAF、CDK 等激酶抑制剂的先导化合物优化。

材料科学: 作为有机半导体材料的合成前体, 或用于制备荧光探针。

学术研究: 在化学生物学中用于蛋白质-配体相互作用机制研究。

#### 4. 储存条件与使用建议

储存条件: 需密封保存于干燥、避光环境中, 建议温度 2-8°C, 长期储存建议充惰性气体保护。

使用建议: 实验操作需在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解时建议先以少量 DMSO 预溶, 再稀释至目标浓度。

#### 5. 质量控制与安全信息

质量控制: 通过 HPLC 检测纯度 ≥96%, 批次间保留时间偏差 ≤0.5%, 水分含量 ≤0.2%。

安全信息: 该产品对眼睛和呼吸道有轻微刺激性, 操作时应佩戴护目镜和防尘口罩。若意外接触, 需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地有机有害废物法规。

(注: 本说明基于现有实验数据编制, 具体应用需结合用户实验体系进一步验证。)