

2-氨基-3-乙炔基吡嗪

3-ethynylpyrazin-2-amine



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-ethynylpyrazin-2-amine
中文名称	2-氨基-3-乙炔基吡嗪
CAS 号	1005349-13-2
分子式	C ₆ H ₅ N ₃
分子量	119.124
纯度	≥ 96%

产品说明

3-ethynylpyrazin-2-amine 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-ethynylpyrazin-2-amine (中文名: 2-氨基-3-乙炔基吡嗪) 是一种含乙炔基的吡嗪类衍生物, CAS 号为 1005349-13-2, 分子式为 $C_6H_5N_3$, 分子量为 119.124。本品为白色至淡黄色结晶或粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有显著的芳香杂环特性。其结构中氨基与乙炔基的共存使其兼具亲核性与反应活性, 可通过点击化学 (如 CuAAC 反应) 或偶联反应进一步修饰, 是合成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

该化合物在药物化学领域具有重要价值。吡嗪骨架常见于抗结核、抗病毒及抗癌药物中, 而乙炔基的引入可增强其与靶标蛋白的共价结合能力或作为连接子用于生物共轭。氨基的存在则提供了额外的氢键供体位点, 可能优化药物分子的靶向性与溶解度。研究表明, 类似结构在激酶抑制剂和核苷类似物开发中表现出潜在活性。

3. 主要应用领域与具体用途

2-氨基-3-乙炔基吡嗪主要用于以下领域:

- (1) 医药研发: 作为小分子抑制剂的核心片段, 用于设计靶向 EGFR、ALK 等激酶的候选药物。
- (2) 材料科学: 通过聚合反应制备含氮杂环导电高分子材料。
- (3) 探针合成: 修饰荧光标记物或生物素后, 用于蛋白质相互作用研究。
- (4) 农药化学: 作为杀菌剂或杀虫剂的中间体。

4. 储存条件与使用建议

本品需避光密封保存于 $-20^{\circ}C$ 干燥环境中, 长期储存建议充入惰性气体。开封后需在干燥箱内操作, 避免吸湿。使用时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩, 反应应在通风橱中进行。溶解性测试表明其易溶于 DMSO、甲醇, 微溶于水, 建议预先配制储备液并分装冻存。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，残留溶剂符合 ICH 标准。MS 与 NMR 谱图确保结构准确性。安全数据：急性毒性（LD50 大鼠口服）尚未完全明确，但类似结构显示可能刺激眼睛和呼吸道。操作时避免吸入粉尘或接触皮肤，若意外接触需用大量清水冲洗并及时就医。废弃物处理应遵循当地危险化学品法规。

本产品仅供科研用途，不适用于临床或食品领域。