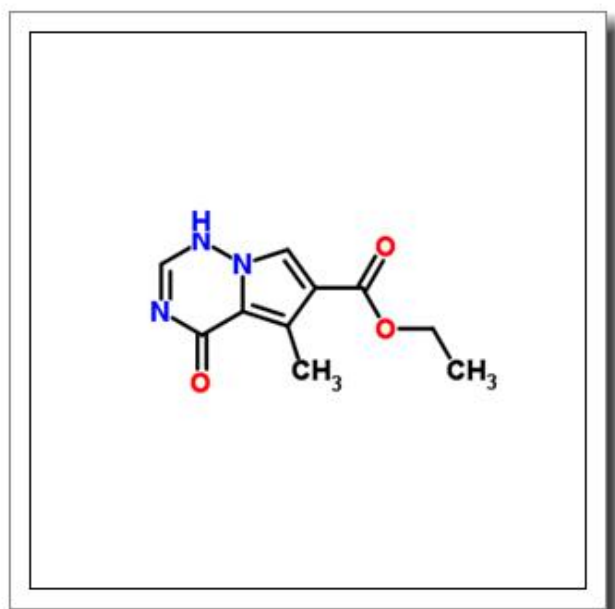


5-甲基-4-氧代-3,4-二氢吡咯并[1,2-F][1,2,4]三嗪-6-羧酸乙酯

Ethyl 5-methyl-4-oxo-1,4-dihydropyrrolo[2,1-f][1,2,4]triazine-6-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 5-methyl-4-oxo-1,4-dihydropyrrolo[2,1-f][1,2,4]triazine-6-carboxylate
中文名称	5-甲基-4-氧代-3,4-二氢吡咯并[1,2-F][1,2,4]三嗪-6-羧酸乙酯
CAS 号	427878-70-4
分子式	C10H11N3O3
分子量	221.213
纯度	≥96%

产品说明

5-甲基-4-氧代-3,4-二氢吡咯并[1,2-f][1,2,4]三嗪-6-羧酸乙酯 (Ethyl 5-methyl-4-oxo-1,4-dihydropyrrolo[2,1-f][1,2,4]triazine-6-carboxylate) 是一种高纯度有机化合物, CAS 号为 427878-70-4, 分子式为 C₁₀H₁₁N₃O₃, 分子量为 221.213。该化合物属于吡咯并三嗪类衍生物, 具有独特的杂环结构, 常温下为白色至类白色结晶或粉末, 纯度 ≥96%, 在有机合成和药物研发中具有重要价值。

1. 产品概述与化学特性

该化合物以吡咯环和三嗪环稠合为核心结构, 羧酸乙酯基团增强了其溶解性和反应活性。其分子中的氧代和氮杂原子使其具备良好的配位能力和氢键形成潜力, 适合作为中间体参与多种有机反应。化学稳定性良好, 但在强酸、强碱或高温条件下可能发生水解或分解。

2. 生物化学功能与重要性

作为杂环化合物, 该物质可通过干扰核酸代谢或酶活性发挥作用, 在抗病毒和抗肿瘤药物研发中显示出潜力。其结构特征使其能够模拟天然嘌呤或嘧啶类似物, 成为设计核苷类药物的关键骨架。在生物活性筛选中, 此类衍生物常表现出抗菌或抗炎特性。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于医药研发领域, 具体用途包括: 作为抗病毒药物 (如 RNA 病毒抑制剂) 的合成前体; 用于构建激酶抑制剂的核心结构; 在农药化学中开发新型杀虫剂或杀菌剂。实验室中可用于杂环化合物结构-活性关系研究, 或作为荧光标记物的修饰基团。

4. 储存条件与使用建议

建议在 2-8°C 干燥避光条件下储存, 长期保存需充惰性气体保护。开封后应尽快使用, 剩余产品需密封保存。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解推荐使用二甲基亚砜 (DMSO) 或乙醇, 工作浓度需根据实验体系优化。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，批次间稳定性良好。MS 和 NMR 谱图数据可提供验证。安全注意事项：可能引起眼睛和皮肤刺激，操作时应佩戴防护手套和护目镜。若发生接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地危险化学品管理规定，不可直接排入下水道。

（注：实际应用中请以具体实验数据和最新文献为准，本说明仅作参考。）