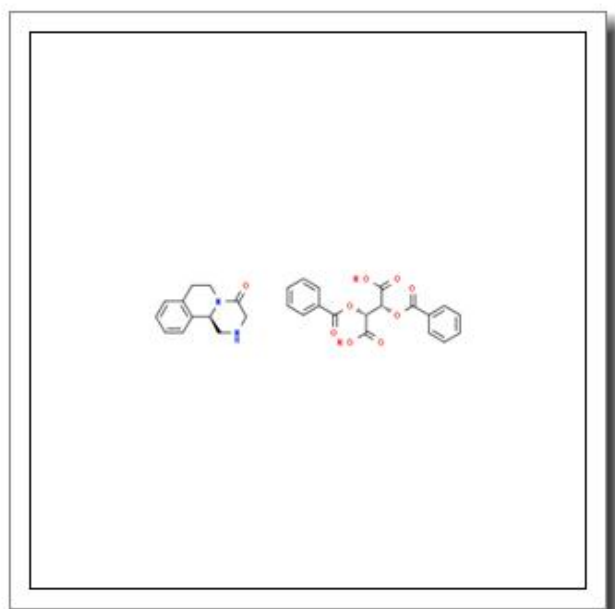


# (R)-2,3,6,7-四氢-1H-吡嗪并[2,1-A]异喹啉-4(11BH)-酮(2R,3R)

*Butanedioic acid, 2,3-bis(benzoyloxy)-, (2R,3R)-, compd. with (11bR)-1,2,3,6,7,11b-hexahydro-4H-pyrazino[2,1-a]isoquinolin-4-one (1:1)*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	Butanedioic acid, 2,3-bis(benzoyloxy)-, (2R,3R)-, compd. with (11bR)-1,2,3,6,7,11b-hexahydro-4H-pyrazino[2,1-a]isoquinolin-4-one (1:1)
中文名称	(R)-2,3,6,7-四氢-1H-吡嗪并[2,1-A]异喹啉-4(11BH)-酮(2R,3R)
CAS 号	1399880-37-5
分子式	C30H28N2O9
分子量	560.551
纯度	≥96%



## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

本品为(R)-2, 3, 6, 7-四氢-1H-吡嗪并[2, 1-A]异喹啉-4(11BH)-酮(2R, 3R)的复合物, 化学名称为 Butanedioic acid, 2,3-bis(benzoyloxy)-, (2R,3R)-, compd. with (11bR)-1, 2, 3, 6, 7, 11b-hexahydro-4H-pyrazino[2, 1-a]isoquinolin-4-one (1:1), CAS 号为 1399880-37-5。分子式为 C<sub>30</sub>H<sub>28</sub>N<sub>2</sub>O<sub>9</sub>, 分子量 560.551, 纯度 ≥96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 具有特定的立体构型(2R, 3R), 其结构中的苯甲酰氧基和吡嗪并异喹啉酮骨架赋予其独特的化学与生物活性。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物通过其立体选择性结构与生物靶点相互作用, 可能作为酶抑制剂或受体调节剂发挥作用。其分子中的苯甲酰氧基可增强脂溶性, 促进跨膜运输, 而吡嗪并异喹啉酮核心结构常见于具有药理活性的分子中, 暗示其在信号转导或代谢调控中的潜在应用价值。

### 3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于药物研发领域, 尤其作为手性合成中间体或先导化合物, 用于开发中枢神经系统药物、抗肿瘤剂或抗菌药物。在有机合成中, 可用于构建复杂杂环体系或作为不对称催化反应的配体。此外, 在生化研究中可能用于探索酶机制或蛋白质相互作用。

### 4. 储存条件与使用建议

建议避光密封保存于-20℃干燥环境中, 长期储存需充惰性气体保护。使用时需在干燥惰性气氛下操作, 避免反复冻融。溶解性测试表明其易溶于 DMSO、DMF 等极性有机溶剂, 水溶性较低, 建议先用少量有机溶剂助溶后再稀释至工作浓度。

### 5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, 残留溶剂符合 ICH 标准。操作时需穿戴防护装备(手套、护目镜及实验服), 避免吸入或皮肤接触。MSDS 数据显示其可能对眼睛和呼

吸道有刺激性，应急处理需参照化学品泄漏标准程序。废弃物处置应遵守当地法规，不可直接排入下水道。

注：本说明基于现有研究数据，具体应用需进一步实验验证。使用前请查阅最新文献并评估实验风险。