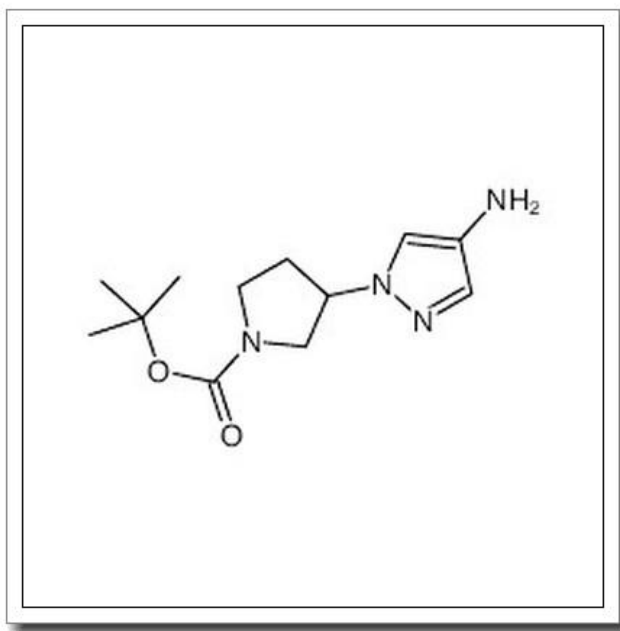


3-(4-氨基-1H-吡唑-1-基)吡咯烷-1-羧酸叔丁酯

tert-butyl 3-(4-aminopyrazol-1-yl)pyrrolidine-1-carboxylate



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|--|
| 化学名称 | <i>tert-butyl 3-(4-aminopyrazol-1-yl)pyrrolidine-1-carboxylate</i> |
| 中文名称 | 3-(4-氨基-1H-吡唑-1-基)吡咯烷-1-羧酸叔丁酯 |
| CAS 号 | 1029413-53-3 |
| 分子式 | C ₁₂ H ₂₀ N ₄ O ₂ |
| 分子量 | 252.313 |
| 纯度 | >96% |

产品说明

3-(4-氨基-1H-吡唑-1-基)吡咯烷-1-羧酸叔丁酯 (tert-butyl 3-(4-aminopyrazol-1-yl)pyrrolidine-1-carboxylate) 是一种重要的有机中间体, CAS 号为 1029413-53-3, 分子式为 C₁₂H₂₀N₄O₂, 分子量为 252.313。该化合物为白色至类白色固体, 纯度通常高于 96%, 具有稳定的化学性质, 在常温下不易分解。

1. 产品概述与化学特性

该化合物结构中含有吡咯烷和吡唑环, 叔丁氧羰基 (Boc) 保护基赋予其良好的溶解性和反应选择性。其氨基和羧酸酯官能团使其成为多官能团修饰的理想底物, 常用于有机合成中的偶联反应和杂环构建。

2. 生物化学功能与重要性

作为医药中间体, 该分子在药物研发中具有关键作用。其吡唑环和氨基结构可参与氢键形成, 增强与生物靶点的相互作用, 常用于激酶抑制剂和抗肿瘤药物的合成。此外, Boc 保护基可在酸性条件下脱除, 便于后续衍生化。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于药物化学领域, 尤其是小分子抗肿瘤化合物和信号通路抑制剂的合成。例如, 可作为 JAK 激酶抑制剂或 EGFR 抑制剂的关键片段。在材料科学中, 也可用于功能性聚合物的单体修饰。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光保存, 长期储存需充惰性气体保护。使用前需恢复至室温并干燥处理, 避免接触强氧化剂或酸碱。溶解时可选用二甲基亚砜 (DMSO) 或二氯甲烷等有机溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度 ≥ 96%。操作时需佩戴防护手套和护目镜, 避免吸入或皮肤接触。若不慎接触, 应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。

该产品需在专业人员指导下使用, 具体应用请参考相关文献或技术协议。