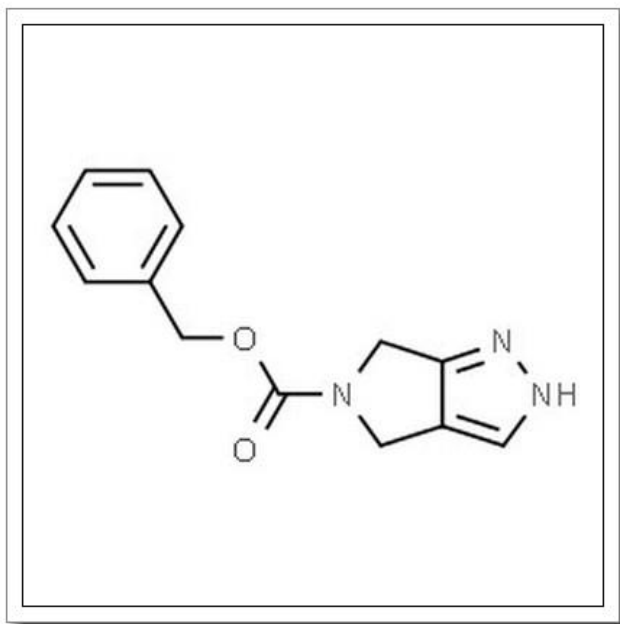


4,6-dihydro-1h-pyrrolo[3,4-c]pyrazole-5-carboxylic acid benzyl ester

Pyrrolo[3,4-c]pyrazole-5(1H)-carboxylic acid, 4,6-dihydro-, phenylmethyl ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	Pyrrolo[3,4-c]pyrazole-5(1H)-carboxylic acid, 4,6-dihydro-, phenylmethyl ester
中文名称	4,6-dihydro-1h-pyrrolo[3,4-c]pyrazole-5-carboxylic acid benzyl ester
CAS 号	1440526-39-5
分子式	C13H13N3O2
分子量	243.26
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为 Pyrrolo[3,4-c]pyrazole-5(1H)-carboxylic acid, 4,6-dihydro-, phenylmethyl ester (化学名称), 中文名称为 4,6-二氢-1H-吡咯并[3,4-c]吡唑-5-羧酸苄酯, CAS 号为 1440526-39-5。其分子式为 C₁₃H₁₃N₃O₂, 分子量为 243.26, 纯度高于 96%。该化合物属于吡咯并吡唑类衍生物, 具有独特的杂环结构, 苄酯基团的引入增强了其脂溶性和稳定性, 适合作为有机合成中间体或生物活性分子研究的核心骨架。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其吡咯并吡唑核心结构, 在药物化学中表现出显著的生物活性潜力。其杂环体系可作为激酶抑制剂的药效团, 或通过结构修饰用于开发抗肿瘤、抗炎及神经保护剂。苄酯基团的存在便于后续水解或衍生化, 为靶向药物设计提供灵活的功能化位点。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药研发领域, 具体用途包括: 作为小分子抑制剂的关键中间体, 用于构建激酶或蛋白酶抑制剂库; 在荧光探针合成中作为杂环载体; 亦可用于材料科学中功能化聚合物的单体。其高纯度特性确保其在高通量筛选和结构-活性关系研究中具有可靠的重现性。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20°C 下避光干燥储存, 长期保存需充惰性气体保护。开封后需密封防潮, 避免反复冻融。使用时应在惰性气氛 (如氮气) 下操作, 溶解推荐使用无水 DMF 或 DMSO。实验过程中需佩戴防护手套及护目镜, 确保通风良好。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 验证纯度 >96%, 批次间稳定性严格监控。安全数据表明, 其可能对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时应避免直接接触。如意外吸入或摄入, 需立即就医并提供 MSDS 信息。废弃物处置需符合当地法规, 不可直接排入环境。

注：以上信息基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件进一步验证。