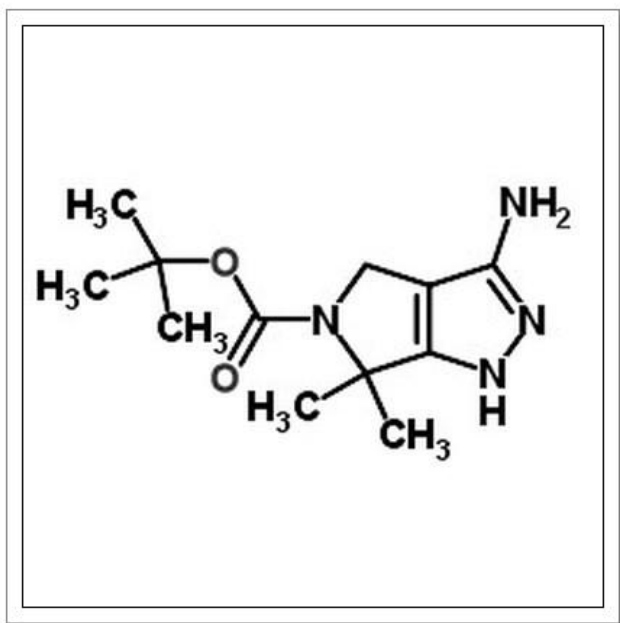


# 叔-丁基 3-氨基-6,6-二甲基-4,6-二氢吡咯并[3,4-c]吡唑-5(2H)-甲酸基酯

*tert-butyl 3-amino-6,6-dimethyl-4,6-dihydropyrrolo[3,4-c]pyrazole-5(1H)-carboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl 3-amino-6,6-dimethyl-4,6-dihydropyrrolo[3,4-c]pyrazole-5(1H)-carboxylate</i>
中文名称	叔-丁基 3-氨基-6,6-二甲基-4,6-二氢吡咯并[3,4-c]吡唑-5(2H)-甲酸基酯
CAS 号	718632-44-1
分子式	C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>
分子量	252.313
纯度	>96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

本品为叔-丁基 3-氨基-6,6-二甲基-4,6-二氢吡咯并[3,4-c]吡唑-5(2H)-甲酸基酯 (tert-butyl 3-amino-6,6-dimethyl-4,6-dihydropyrrolo[3,4-c]pyrazole-5(1H)-carboxylate), CAS 号 718632-44-1, 分子式 C<sub>12</sub>H<sub>20</sub>N<sub>4</sub>O<sub>2</sub>, 分子量 252.313。该化合物是一种高纯度 (>96%) 的杂环有机中间体, 结构中含有吡咯并吡唑骨架和叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团, 兼具亲水性与脂溶性, 在常温下呈白色至类白色结晶或粉末状。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为吡咯并吡唑类衍生物, 其氨基与 Boc 保护基的协同作用使其成为药物化学中关键的合成砌块。该结构可通过脱保护反应释放活性氨基, 进一步参与酰胺化、缩合等反应, 广泛用于构建激酶抑制剂、抗肿瘤及抗炎药物的核心骨架。其 6,6-二甲基修饰可增强立体位阻效应, 提升衍生物代谢稳定性。

### 3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于创新药物研发, 尤其在蛋白激酶抑制剂 (如 CDK、JAK 家族抑制剂) 的临床前研究中作为中间体。具体用途包括: 1) 通过 Boc 脱保护制备氨基活性中间体; 2) 作为模板结构用于高通量筛选库构建; 3) 与羧酸类化合物缩合制备靶向小分子化合物。在材料科学领域, 也可用于功能化聚合物的单体合成。

### 4. 储存条件与使用建议

建议在-20°C、惰性气体 (如氩气) 保护下避光保存, 长期储存需置于干燥器中。开封后需充氮密封, 避免反复冻融。使用时需在干燥环境下操作, 建议以无水 DMSO 或 DMF 溶解, 浓度不超过 10 mM。Boc 基团对酸敏感, 反应体系中需避免强酸性条件。

### 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 Q3C 标准。安全数据: 1) 穿戴防护手套、护目镜及防尘口罩; 2) 避免吸入或接触皮肤, 如意外接触需用大量清水冲

洗; 3) MSDS 显示其急性毒性为 LD50>500 mg/kg (大鼠口服), 但仍需按有害化学品规范处置废弃物。运输分类为非危险品, 但需符合化学品通用运输条件。