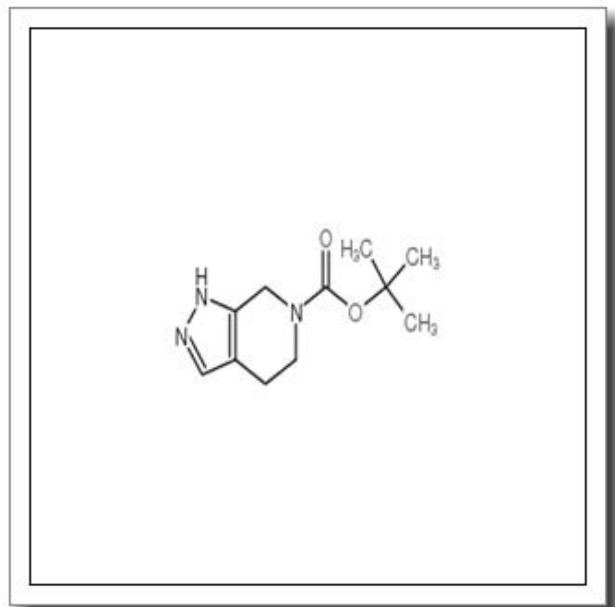


1,4,5,7-四氢-6H-吡唑并[3,4-C]吡啶-6-羧酸叔丁酯

tert-butyl 1, 4, 5, 7-tetrahydropyrazolo[3, 4-c]pyridine-6-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 1, 4, 5, 7-tetrahydropyrazolo[3, 4-c]pyridine-6-carboxylate
中文名称	1, 4, 5, 7-四氢-6H-吡唑并[3, 4-C]吡啶-6-羧酸叔丁酯
CAS 号	871726-73-7
分子式	C ₁₁ H ₁₇ N ₃ O ₂
分子量	223. 272
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 1,4,5,7-四氢-6H-吡唑并[3,4-C]吡啶-6-羧酸叔丁酯 (tert-butyl 1,4,5,7-tetrahydropyrazolo[3,4-c]pyridine-6-carboxylate), CAS 号为 871726-73-7, 分子式为 C₁₁H₁₇N₃O₂, 分子量为 223.272。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度≥96%, 属于吡唑并吡啶类衍生物, 具有稳定的叔丁酯基团和稠合杂环结构, 易溶于有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡唑并吡啶类骨架的核心中间体, 该化合物在药物化学中具有重要价值。其结构中的四氢吡唑并吡啶环系可作为激酶抑制剂、G 蛋白偶联受体 (GPCR) 调节剂等药物的关键药效团, 广泛用于抗肿瘤、抗炎及神经系统疾病药物的研发。叔丁酯基团的引入增强了分子的脂溶性和代谢稳定性, 便于后续衍生化反应。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发领域, 具体包括:

- (1) 作为小分子靶向药物的合成砌块, 用于构建激酶抑制剂 (如 JAK、CDK 家族抑制剂);
- (2) 用于神经退行性疾病药物开发, 通过调节神经递质受体发挥作用;
- (3) 在有机合成中作为多官能团化中间体, 参与偶联、水解、脱保护等反应。

4. 储存条件与使用建议

建议在-20℃下密封避光保存, 长期储存需充惰性气体保护。开封后需在干燥环境中尽快使用, 避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解推荐使用无水 DMSO, 配制溶液建议现配现用, 避免长时间暴露于潮湿环境。

5. 质量控制与安全信息

本品通过 HPLC 检测纯度≥96%, 残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明, 该化合物

可能对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应避免直接接触。如不慎接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需遵守当地化学品管理法规，不可直接排入下水道。

（注：实际应用中需结合具体实验需求查阅最新文献或进行安全评估。）