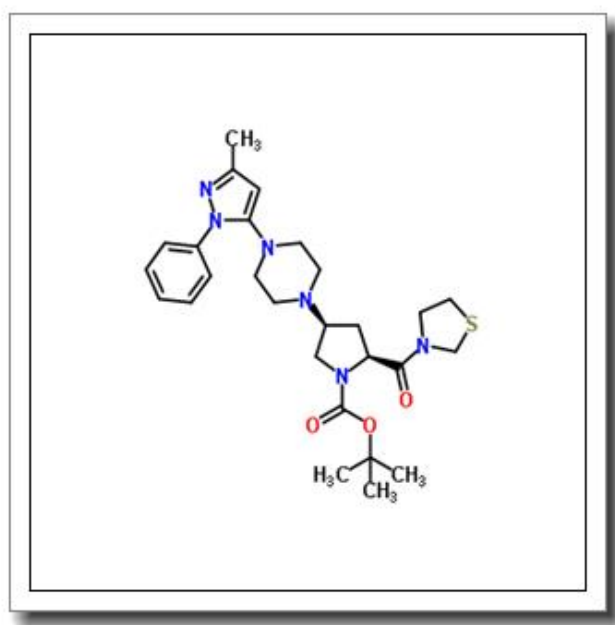


(2S,4S)-4-[4-(3-甲基-1-苯基-1H-吡唑-5-基)-1-哌嗪基]-2-(3-噻唑烷基羰基)-1-吡咯烷羧酸叔丁酯

(2S, 4S)-4-[4-(3-Methyl-1-phenyl-1H-pyrazol-5-yl)-1-piperazinyl]-2-(3-thiazolidinylcarbonyl)-1-pyrrolidinecarboxylic acid tert-butyl ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2S, 4S)-4-[4-(3-Methyl-1-phenyl-1H-pyrazol-5-yl)-1-piperazinyl]-2-(3-thiazolidinylcarbonyl)-1-pyrrolidinecarboxylic acid tert-butyl ester
中文名称	(2S, 4S)-4-[4-(3-甲基-1-苯基-1H-吡唑-5-基)-1-哌嗪基]-2-(3-噻唑烷基羰基)-1-吡咯烷羧酸叔丁酯
CAS 号	401566-80-1
分子式	C27H38N6O3S

分子量	526.694
纯度	$\geq 96\%$

产品说明

(2S, 4S) -4-[4-(3-甲基-1-苯基-1H-吡唑-5-基)-1-哌嗪基]-2-(3-噻唑烷基羰基)-1-吡咯烷羧酸叔丁酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为高纯度有机化合物，化学名称如标题所示，CAS 号为 401566-80-1，分子式 C₂₇H₃₈N₆O₃S，分子量 526.694。其结构包含吡唑、哌嗪、噻唑烷及吡咯烷环系，叔丁酯基团赋予其良好的溶解性与稳定性。常温下呈白色至类白色结晶粉末，纯度 ≥96% (HPLC 检测)，适用于高精度生化研究。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为多环杂化分子，其结构特征使其在药物研发中具有潜在活性。哌嗪基团可增强与靶标蛋白的相互作用，噻唑烷羰基则可能参与氢键形成，而叔丁酯保护基在合成中提供位点选择性。其特异性结构使其成为激酶抑制剂或 GPCR 配体设计的重要中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药化学和生物化学领域：一是作为小分子探针用于酶活性研究，尤其是与炎症或肿瘤相关的信号通路；二是作为关键中间体用于合成具有生物活性的先导化合物；三是在结构-活性关系 (SAR) 研究中用于优化药效团模型。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20°C 干燥环境中，避免光照及反复冻融。使用时需在惰性气体（如氮气）保护下操作，溶解推荐使用 DMSO 或二氯甲烷等有机溶剂。工作浓度需根据实验体系预先优化，建议佩戴防护手套并在通风橱中处理。

5. 质量控制与安全信息

批次纯度经 HPLC 及质谱双重验证，残留溶剂符合 ICH 标准。该化合物可能存在刺激性，安全数据表 (SDS) 显示其急性毒性类别为 4 级 (低危)，但仍需避免吸入或皮肤直接接触。废弃物处置应遵循有机卤化物处理规范。

注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件进一步验证。