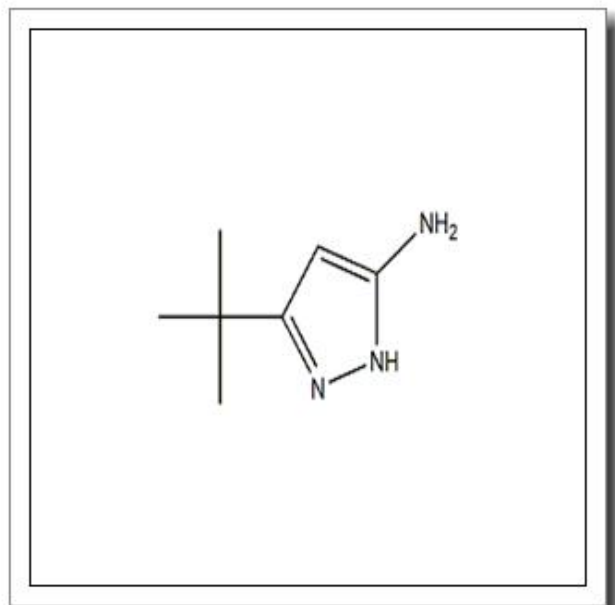


3-(tert-butyl)-1H-pyrazol-5-amine

3-(tert-butyl)-1H-pyrazol-5-amine



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-(tert-butyl)-1H-pyrazol-5-amine
中文名称	3-(tert-butyl)-1H-pyrazol-5-amine
CAS 号	1237537-54-0
分子式	C ₇ H ₁₃ N ₃
分子量	139.19822
纯度	≥96%

产品说明

3-(tert-butyl)-1H-pyrazol-5-amine 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 3-(叔丁基)-1H-吡唑-5-胺, CAS 号为 1237537-54-0, 分子式为 C₇H₁₃N₃, 分子量为 139.19822。该化合物为白色至淡黄色结晶性粉末, 纯度 ≥96%, 属于吡唑胺类衍生物, 具有稳定的芳香杂环结构和碱性氨基官能团。其叔丁基取代基赋予分子空间位阻效应, 显著影响反应活性和溶解性, 易溶于有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡唑胺类化合物的关键中间体, 其结构中的氨基和吡唑环可作为配体参与金属络合反应, 或通过修饰构建更复杂的杂环体系。在药物化学中, 此类结构常作为激酶抑制剂、抗菌剂或抗炎剂的药效团核心, 尤其在靶向性小分子药物设计中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药研发、有机合成及材料科学领域。具体用途包括:

- 医药中间体: 用于合成抗肿瘤、抗感染等靶向药物。
- 配体化学: 作为过渡金属催化反应的配体前体。
- 农药开发: 修饰后可用于新型杀虫剂或杀菌剂的制备。
- 科研试剂: 用于杂环化合物库构建及结构-活性关系研究。

4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光条件下密封保存, 长期储存温度需控制在 2-8°C。开封后需充惰性气体保护以避免氧化。使用时应佩戴防护手套和护目镜, 在通风橱中操作。溶解时优先选用无水有机溶剂, 若需水相反应, 建议加入适量助溶剂如 Tween-80。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测, 确保杂质含量符合标准。安全数据表明, 其急性毒性 (LD₅₀) 为口服大鼠 >500 mg/kg, 但可能对眼睛和皮肤产生刺激性。操作时

需避免吸入粉尘，如意外接触需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置应遵循当地化学品管理法规。

（注：实际使用前请务必查阅最新版物质安全数据表 MSDS 并执行风险评估。）