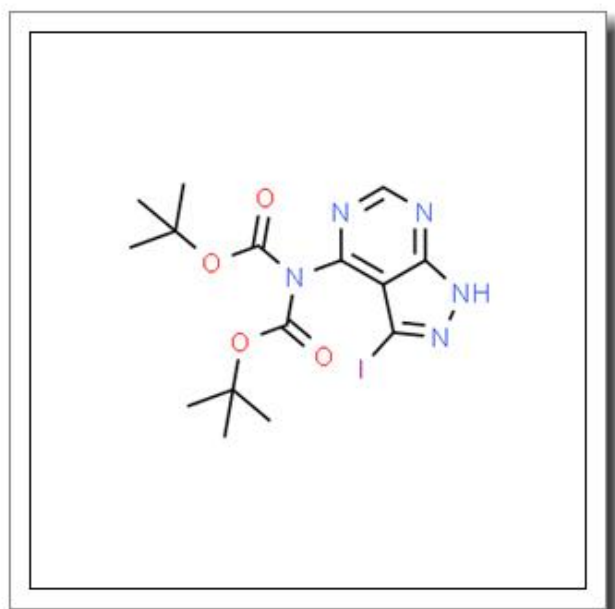


(3-碘-1H-吡唑并[3,4-D]嘧啶-4-基)氨基双甲酸叔丁酯

Imidodicarbonic acid, 2-(3-iodo-1H-pyrazolo[3,4-d]pyrimidin-4-yl)-, 1,3-bis(1,1-dimethylethyl) ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	Imidodicarbonic acid, 2-(3-iodo-1H-pyrazolo[3,4-d]pyrimidin-4-yl)-, 1,3-bis(1,1-dimethylethyl) ester
中文名称	(3-碘-1H-吡唑并[3,4-D]嘧啶-4-基)氨基双甲酸叔丁酯
CAS 号	1513882-52-4
分子式	C ₁₅ H ₂₀ N ₅ O ₄
分子量	461.25
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为咪唑二碳酸衍生物，化学名称为 2-(3-碘-1H-吡唑并[3,4-d]嘧啶-4-基)-1,3-双(1,1-二甲基乙基)酯，CAS 号 1513882-52-4，分子式 C₁₅H₂₀IN₅O₄，分子量 461.25。该化合物为白色至类白色结晶粉末，纯度≥96%，具有稳定的化学性质，在常温下不易分解。其结构中的碘代吡唑并嘧啶基团与双叔丁酯保护基赋予其独特的反应活性，适用于多种有机合成与修饰反应。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为嘧啶类衍生物，可通过抑制特定激酶活性干扰核苷酸代谢途径，在生物化学研究中常用于蛋白激酶抑制剂的合成前体。其碘原子可作为放射性标记位点，用于追踪药物代谢或分子探针开发。双叔丁酯保护基在酸性条件下可选择性脱除，为后续功能化修饰提供灵活性。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域，本品是构建抗肿瘤、抗病毒小分子抑制剂的关键中间体，尤其用于布鲁顿酪氨酸激酶（BTK）抑制剂的合成。在化学生物学中，可作为荧光标记探针的骨架分子。此外，在材料科学中可用于制备功能化核酸类似物或金属配合物催化剂。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于-20℃干燥环境中，避免光照与潮湿。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时应佩戴防护手套与护目镜，在通风橱中操作。溶解性测试表明其易溶于 DMSO、DMF 等极性有机溶剂，推荐工作浓度为 1-10 mM。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度≥96%，重金属含量<10 ppm，符合生化试剂标准。安全数据表明其具有刺激性，接触皮肤或眼睛需立即用大量清水冲洗。废弃物应作为有害化学品处理，不可直接排放。运输分类为 UN2811，需符合危险品运输规范。

注：具体实验方案需结合目标反应体系优化，建议参考文献报道的合成方法或咨询专业技术支持。