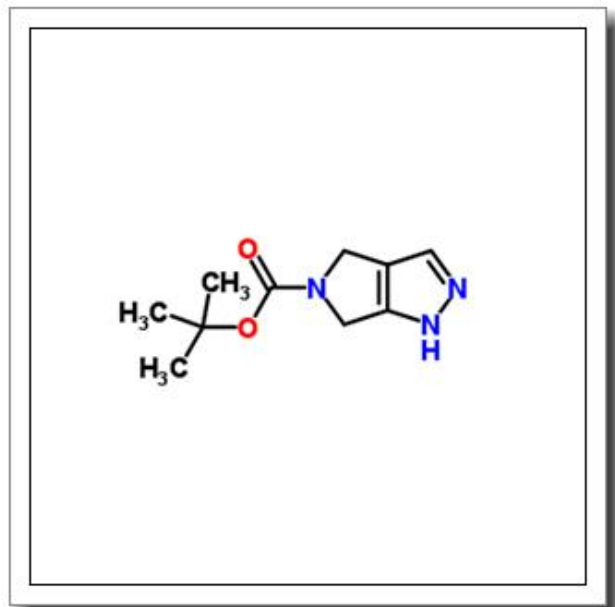


吡咯并[3,4-c]吡唑-5(2H,4h,6h)-羧酸叔丁酯

tert-Butyl 4,6-dihydropyrrolo[3,4-c]pyrazole-5(2H)-carboxylate



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|-----------------------------------------------------------------------|
| 化学名称 | <i>tert-Butyl 4,6-dihydropyrrolo[3,4-c]pyrazole-5(2H)-carboxylate</i> |
| 中文名称 | 吡咯并[3,4-c]吡唑-5(2H,4h,6h)-羧酸叔丁酯 |
| CAS 号 | 1280210-79-8 |
| 分子式 | C ₁₀ H ₁₅ N ₃ O ₂ |
| 分子量 | 209.245 |
| 纯度 | ≥96% |

产品说明

1. 产品概述与化学特性

吡咯并[3,4-c]吡唑-5(2H,4h,6h)-羧酸叔丁酯 (化学名称: tert-Butyl 4,6-dihydropyrrolo[3,4-c]pyrazole-5(2H)-carboxylate) 是一种重要的有机中间体, CAS 号为 1280210-79-8, 分子式为 C₁₀H₁₅N₃O₂, 分子量为 209.245。该化合物为白色至类白色固体, 纯度 ≥96%, 具有吡咯并吡唑骨架结构, 其叔丁酯基团赋予其良好的稳定性和溶解性, 适用于多种有机合成反应。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为杂环衍生物, 在药物化学和生物活性分子设计中具有重要价值。其吡咯并吡唑结构是许多生物活性分子的核心骨架, 可用于构建激酶抑制剂、抗肿瘤药物和抗炎药物的关键中间体。叔丁酯基团的引入进一步增强了其反应选择性, 使其在保护基化学和官能团转化中具有广泛应用。

3. 主要应用领域与具体用途

吡咯并[3,4-c]吡唑-5(2H,4h,6h)-羧酸叔丁酯主要用于医药研发和精细化工领域。在药物合成中, 它是构建激酶抑制剂 (如 JAK 抑制剂) 的重要前体, 也可用于开发抗病毒和抗肿瘤化合物。此外, 该产品还可作为有机合成中的砌块, 用于复杂杂环体系的构建, 或通过脱保护反应生成游离羧酸衍生物。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于干燥、避光的环境中, 储存温度为 2-8° C, 以保持其长期稳定性。开封后需充入惰性气体 (如氮气) 密封保存, 避免吸湿和氧化。使用时应佩戴防护手套和护目镜, 在通风良好的条件下操作。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二甲基亚砷 (DMSO) 和氯仿, 微溶于甲醇, 使用时需根据反应体系选择合适的溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度 ≥96%, 并提供完整的质检报告 (COA)。其结构经核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 验证。安全信息方面, 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。废弃物处理需符合当地环保法规，建议通过专业化学废弃物回收渠道处置。