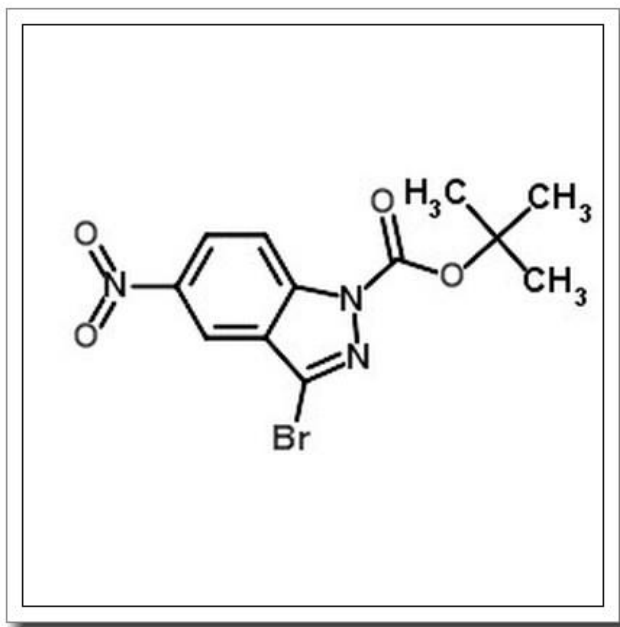


1-Boc-3-溴-5-硝基-1H-吡唑

3-Bromo 5-nitro-indazole-1-carboxylic acid tert-butyl ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-Bromo 5-nitro-indazole-1-carboxylic acid tert-butyl ester
中文名称	1-Boc-3-溴-5-硝基-1H-吡唑
CAS 号	473416-22-7
分子式	C ₁₂ H ₁₂ BrN ₃ O ₄
分子量	342.145
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-Boc-3-溴-5-硝基-1H-吡唑 (CAS 号: 473416-22-7) 是一种重要的吡唑类衍生物, 化学名为 3-Bromo 5-nitro-indazole-1-carboxylic acid tert-butyl ester, 分子式为 $C_{12}H_{12}BrN_3O_4$, 分子量为 342.145。该化合物为白色至淡黄色结晶性粉末, 纯度高于 96%, 具有较高的化学稳定性。其结构中的 Boc 保护基 (叔丁氧羰基) 和溴、硝基取代基使其在有机合成中具有独特的反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为吡唑类骨架的衍生物, 在药物化学和生物化学研究中具有重要价值。吡唑类结构广泛存在于多种生物活性分子中, 如激酶抑制剂和抗肿瘤药物。3-溴和 5-硝基的引入可进一步修饰其电子效应和空间位阻, 为药物先导化合物的设计与优化提供关键中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

1-Boc-3-溴-5-硝基-1H-吡唑主要用于医药研发和有机合成领域。具体用途包括:

- 作为关键中间体用于合成具有潜在抗肿瘤、抗炎或抗菌活性的吡唑类化合物。
- 在激酶抑制剂研究中用于构建分子库, 探索结构-活性关系。
- 通过进一步官能团化 (如偶联反应) 制备复杂杂环化合物。

4. 储存条件与使用建议

该产品需在干燥、避光条件下储存, 推荐温度为 2-8° C, 长期保存建议置于惰性气体 (如氮气) 环境中。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和部分有机溶剂, 水溶性较差。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 >96%, 并提供 COA (质量分析证书)。安全信息如下:

- 可能对眼睛、皮肤和呼吸道产生刺激, 操作时需佩戴防护手套、护目镜和口罩。
- 避免与强氧化剂接触, 以防剧烈反应。

- 废弃物处置需符合当地环保法规。如需进一步毒理学数据，请参考产品 MSDS（材料安全数据表）。