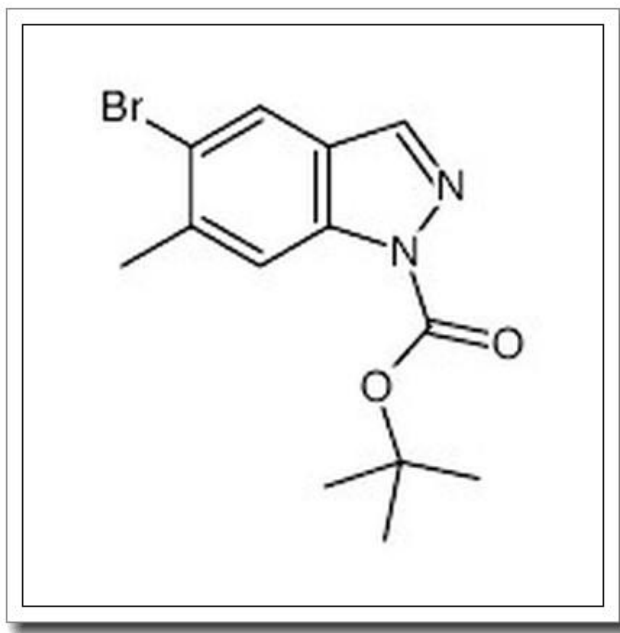


1-Boc-5-溴-6-甲基-1H-吲唑

tert-Butyl 5-bromo-6-methyl-1H-indazole-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-Butyl 5-bromo-6-methyl-1H-indazole-1-carboxylate</i>
中文名称	1-Boc-5-溴-6-甲基-1H-吲唑
CAS 号	1305320-67-5
分子式	C ₁₃ H ₁₅ BrN ₂ O ₂
分子量	311.174
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶粉末，化学名称为 tert-Butyl 5-bromo-6-methyl-1H-indazole-1-carboxylate (1-Boc-5-溴-6-甲基-1H-吡唑)，CAS 号为 1305320-67-5，分子式为 C₁₃H₁₅BrN₂O₂，分子量为 311.174。该化合物属于吡唑类衍生物，具有稳定的 Boc 保护基团，纯度经 HPLC 检测确认大于 96%。其结构中的溴原子和甲基取代基赋予其独特的反应活性，适用于多种有机合成反应。

2. 生物化学功能与重要性

1-Boc-5-溴-6-甲基-1H-吡唑是一种重要的医药中间体，广泛应用于药物研发领域。其分子结构中的吡唑环是许多生物活性分子的核心骨架，具有潜在的抗肿瘤、抗炎和抗病毒活性。Boc 保护基的存在使其在合成过程中易于脱保护，进一步衍生化为目标化合物。该产品在构建杂环化合物和功能化吡唑衍生物中具有关键作用。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药和农药领域的有机合成，具体用途包括：作为关键中间体用于合成小分子抑制剂；参与 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等交叉偶联反应；用于构建含吡唑结构的候选药物分子。此外，它还可作为科研试剂，用于研究吡唑类化合物的构效关系和生物活性机制。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品密封保存于 2-8°C 的干燥环境中，避免光照和潮湿。开封后需充入惰性气体（如氮气）以延长稳定性。使用时应在通风良好的环境下操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明，该化合物易溶于二甲基亚砜（DMSO）和氯仿，微溶于甲醇，不溶于水。

5. 质量控制与安全信息

本产品经严格的质量控制，包括 HPLC 纯度分析、核磁共振（NMR）和质谱（MS）验证。安全数据表明，该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激，操作时需佩

戴防护手套、护目镜和防尘口罩。如意外接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地环保法规，建议通过专业化学品回收机构处理。