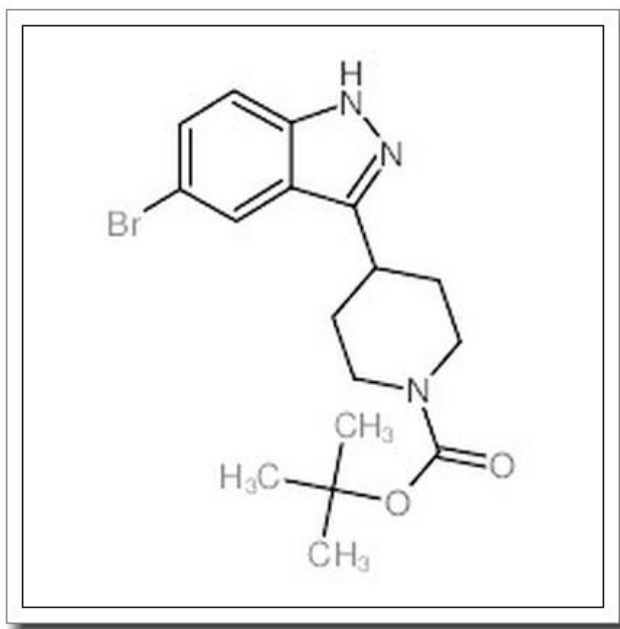


4-(5-溴-1H-吡唑-3-基)哌啶-1-羧酸叔丁酯

tert-butyl 4-(5-bromo-2H-indazol-3-yl)piperidine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl 4-(5-bromo-2H-indazol-3-yl)piperidine-1-carboxylate</i>
中文名称	4-(5-溴-1H-吡唑-3-基)哌啶-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	1198284-77-3
分子式	C ₁₇ H ₂₂ BrN ₃ O ₂
分子量	380.279
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

4-(5-溴-1H-吡唑-3-基)哌啶-1-羧酸叔丁酯 (CAS 号: 1198284-77-3) 是一种有机溴化合物, 分子式为 $C_{17}H_{22}BrN_3O_2$, 分子量为 380.279。该化合物以白色至类白色固体形式存在, 纯度高于 96%, 结构中含有吡唑环和哌啶环, 并通过叔丁氧羰基 (Boc) 保护基修饰。其化学特性包括良好的脂溶性和稳定性, 适用于多种有机合成反应。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为吡唑类衍生物, 在药物化学和生物化学研究中具有重要价值。其结构中的溴原子可作为活性位点参与偶联反应 (如 Suzuki 偶联), 而 Boc 保护基可在酸性条件下脱除, 进一步用于构建复杂分子骨架。吡唑环系在激酶抑制剂和抗癌药物开发中常见, 因此该化合物是合成生物活性分子的关键中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

4-(5-溴-1H-吡唑-3-基)哌啶-1-羧酸叔丁酯广泛应用于医药研发和有机合成领域。具体用途包括:

- 作为激酶抑制剂或 GPCR 调节剂的前体化合物
- 用于构建含吡唑结构的候选药物分子
- 在交叉偶联反应中作为溴代底物参与碳-碳键形成

4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于密闭容器中, 储存于 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 的干燥环境中, 避免光照和潮湿。使用前需恢复至室温并检查性状。操作时需在通风橱中进行, 佩戴防护手套和护目镜。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。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确认纯度 $>96\%$, 并提供质谱 (MS) 和核磁共振 (NMR) 数据支持。安全信息提示:

- 可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激
- 避免吸入粉尘或接触黏膜
- 如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医
- 废弃物需按危险化学品规范处置

该化合物需在专业人员指导下使用，建议查阅材料安全数据表（MSDS）获取详细安全指引。