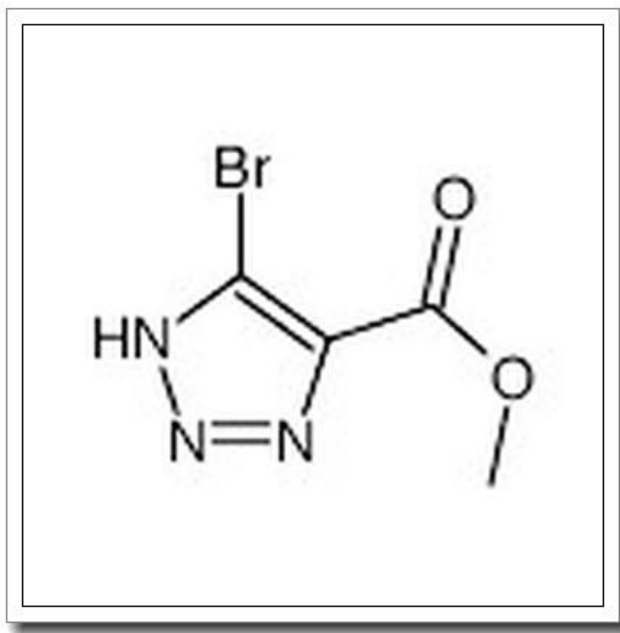


5-溴-1H-1,2,3-三唑-4-甲酸甲酯

Methyl 5-bromo-1H-1,2,3-triazole-4-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 5-bromo-1H-1,2,3-triazole-4-carboxylate
中文名称	5-溴-1H-1,2,3-三唑-4-甲酸甲酯
CAS 号	1427475-25-9
分子式	C ₄ H ₄ BrN ₃ O ₂
分子量	205.997
纯度	>96%

产品说明

5-溴-1H-1,2,3-三唑-4-甲酸甲酯产品说明

1. 产品概述与化学特性

5-溴-1H-1,2,3-三唑-4-甲酸甲酯 (Methyl 5-bromo-1H-1,2,3-triazole-4-carboxylate) 是一种含溴三唑类化合物, CAS 号为 1427475-25-9, 分子式为 $C_4H_4BrN_3O_2$, 分子量为 205.997。本品为白色至类白色结晶或粉末, 纯度 >96%, 具有稳定的化学性质, 可溶于常见有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO, 微溶于水。其结构中的溴原子和羧酸甲酯基团使其成为有机合成中的重要中间体。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为三唑类衍生物, 具有显著的生物活性和分子多样性。三唑环结构在药物化学中广泛存在, 能够参与氢键形成和 $\pi-\pi$ 堆积作用, 增强与生物靶点的相互作用。溴原子的引入进一步提高了其反应活性, 使其在偶联反应和亲核取代反应中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药、农药和材料科学领域。在药物研发中, 可作为构建抗病毒、抗菌或抗肿瘤活性分子的关键中间体。在农药合成中, 用于制备含三唑结构的杀菌剂或杀虫剂。此外, 还可作为配体或前体用于功能材料的合成, 如金属有机框架 (MOFs) 或荧光探针。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光密封保存, 长期储存需充惰性气体保护。使用时需在干燥环境中操作, 避免接触水分或强氧化剂。溶解时建议使用无水溶剂, 并在通风橱中佩戴防护手套和护目镜。

5. 质量控制与安全信息

本品通过 HPLC 和 NMR 严格检测, 确保纯度 >96%。安全信息显示, 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性, 操作时应避免直接接触。若不慎吸入或接触, 应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。

以上信息仅供参考，具体应用需结合实验条件进一步优化。