

5-溴-2-甲基-2H-吲唑

5-Bromo-2-methyl-2H-indazole



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-Bromo-2-methyl-2H-indazole
中文名称	5-溴-2-甲基-2H-吲唑
CAS 号	465529-56-0
分子式	C ₈ H ₇ BrN ₂
分子量	211.059
纯度	>96%

产品说明

5-溴-2-甲基-2H-吡唑产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-溴-2-甲基-2H-吡唑 (5-Bromo-2-methyl-2H-indazole) 是一种含溴取代基的吡唑类有机化合物, CAS 号为 465529-56-0, 分子式为 $C_8H_7BrN_2$, 分子量为 211.059。本品为白色至类白色结晶性粉末, 纯度高于 96%, 具有良好的化学稳定性和溶解性, 可溶于常见有机溶剂如甲醇、乙醇和二甲基亚砜 (DMSO)。其结构中的溴原子和吡唑环体系使其成为有机合成和药物研发中的重要中间体。

2. 生物化学功能与重要性

吡唑类化合物因其独特的杂环结构, 在生物活性分子设计中具有广泛的应用价值。5-溴-2-甲基-2H-吡唑可作为激酶抑制剂、抗癌药物或抗炎药物的关键合成前体。溴原子的引入增强了分子的反应活性, 便于进一步官能团化, 而甲基取代基则可能影响其代谢稳定性和生物利用度。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发和有机合成领域。在药物化学中, 它是构建靶向治疗药物 (如蛋白激酶抑制剂) 的重要砌块。此外, 还可用于荧光探针、材料科学中的配体设计以及农用化学品的研究。具体用途包括但不限于: 作为分子探针研究酶活性位点、参与 Suzuki 偶联反应以构建复杂杂环体系。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光干燥储存, 长期保存需充惰性气体保护。开封后需密封防潮, 避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解前建议进行溶解度测试, 推荐使用无水 DMSO 配制母液 (10-50 mM), 并根据实验需求进一步稀释。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 验证结构。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, 操作时应避免直接接触。

如不慎吸入或接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地化学品管理法规，禁止直接排放至环境中。

（注：本说明基于现有研究数据，实际应用前请查阅最新文献并开展小规模预实验验证。）