

6-bromo-1H-indazole-5-carboxylic acid

6-bromo-1H-indazole-5-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	6-bromo-1H-indazole-5-carboxylic acid
中文名称	6-bromo-1H-indazole-5-carboxylic acid
CAS 号	1893842-64-2
分子式	C ₈ H ₅ BrN ₂ O ₂
分子量	241.0415
纯度	>96%

产品说明

6-溴-1H-吡唑-5-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

6-溴-1H-吡唑-5-羧酸 (6-bromo-1H-indazole-5-carboxylic acid) 是一种含溴取代的吡唑类化合物, CAS 号为 1893842-64-2, 分子式为 $C_8H_5BrN_2O_2$, 分子量为 241.0415。本品为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 >96%, 具有吡唑环的典型化学性质, 包括羧酸基团的酸性和溴原子的亲电反应活性。其结构中的氮杂环和羧基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

该化合物作为吡唑衍生物, 在药物化学和生物化学领域具有显著意义。吡唑骨架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。溴原子的引入可增强其与生物靶点的相互作用, 而羧酸基团则为后续衍生化 (如酰胺化或酯化) 提供了关键位点, 常用于构建更复杂的药物分子或探针化合物。

3. 主要应用领域与具体用途

6-溴-1H-吡唑-5-羧酸主要用于医药研发和有机合成领域。具体用途包括:

- 作为合成小分子抑制剂 (如蛋白激酶抑制剂) 的关键中间体。
- 用于构建吡唑类化合物库, 支持高通量筛选和药物发现。
- 在材料科学中, 可作为功能化配体或荧光标记物的前体。

4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于干燥、避光环境中, 推荐储存温度为 2-8° C, 长期存放建议充惰性气体保护。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, 其可溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和部分极性有机溶剂, 水溶性较差, 建议根据实验需求选择合适的溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 >96%, 并提供相关质检报告 (COA)。安全信息如下:

- 安全术语: 可能引起皮肤和眼睛刺激, 操作时需佩戴防护手套和护目镜。

- 风险提示：避免吸入或食入，如接触皮肤应立即用大量清水冲洗。
- 废弃物处理：按危险化学品规范处置，遵守当地环保法规。

本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件进一步优化。