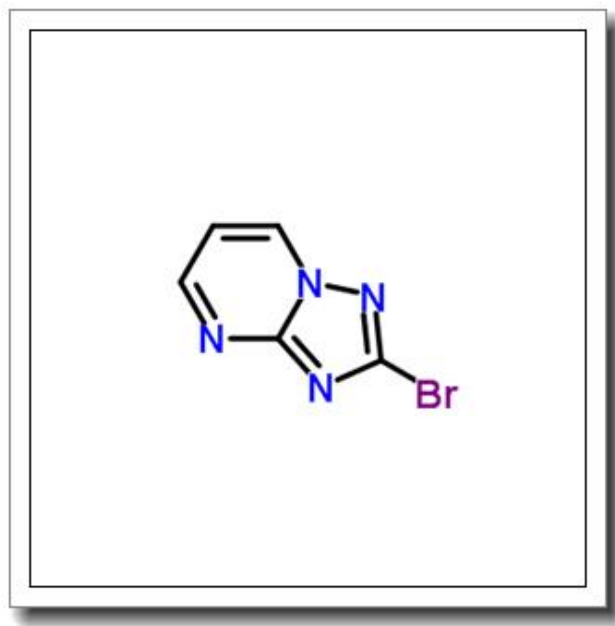


2-溴-[1,2,4]三唑并[1,5-a]嘧啶

2-bromo [1,2,4]triazolo[1,5-a]pyrimidine



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-bromo [1,2,4]triazolo[1,5-a]pyrimidine
中文名称	2-溴-[1,2,4]三唑并[1,5-a]嘧啶
CAS 号	1335054-80-2
分子式	C ₅ H ₃ BrN ₄
分子量	199.008
纯度	≥96%

产品说明

2-溴-[1, 2, 4]三唑并[1, 5-a]嘧啶产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-溴-[1, 2, 4]三唑并[1, 5-a]嘧啶 (CAS 号: 1335054-80-2) 是一种含溴杂环化合物, 分子式为 $C_5H_3BrN_4$, 分子量 199.008。该化合物由三唑并嘧啶骨架与溴取代基构成, 外观通常为白色至类白色结晶粉末, 纯度 $\geq 96\%$ 。其结构中的溴原子赋予其高反应活性, 可作为有机合成中的关键中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为三唑并嘧啶类衍生物, 该化合物在药物化学和材料科学中具有重要价值。其杂环结构能够模拟生物体内嘌呤或嘧啶碱基的特性, 常用于设计核苷类似物或激酶抑制剂。溴原子的引入进一步增强了其作为亲电试剂的潜力, 适用于 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等交叉偶联反应。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本品是构建抗病毒、抗肿瘤药物先导化合物的核心骨架, 尤其用于 HIV 整合酶抑制剂和蛋白激酶抑制剂的合成。在材料科学中, 可作为有机发光二极管 (OLED) 或光电材料的前体。此外, 在农用化学品研发中, 其衍生物可能表现出杀菌或除草活性。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 条件下避光保存, 置于干燥惰性气体 (如氮气) 环境中。开封后需密封保存于原装容器内, 防止吸湿或氧化。使用时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩, 在通风橱中操作。溶解性测试表明, 本品易溶于二甲基亚砜 (DMSO), 微溶于甲醇、乙醇等极性溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 批次间质量稳定。安全数据表明, 其急性毒性 (LD50) 属中等危害类别, 对皮肤和眼睛有刺激性。操作时应避免直接接触, 如发

生暴露需立即用大量清水冲洗。废弃物处置需符合当地危险化学品管理法规，建议通过专业机构处理。

（注：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验证。）