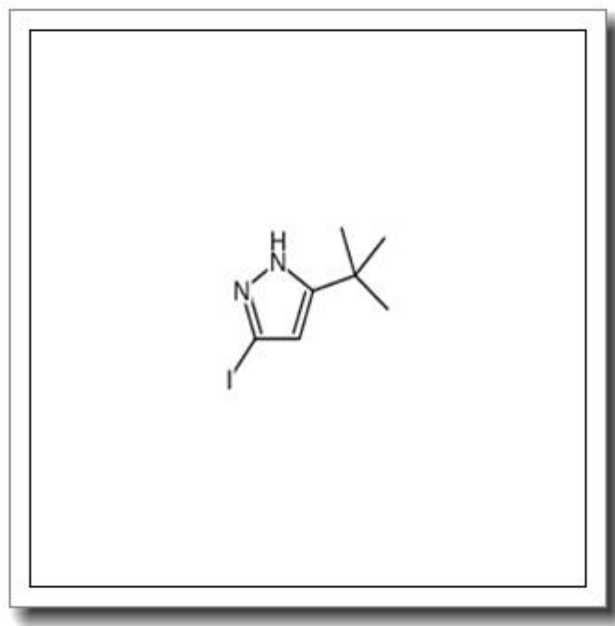


# 3-叔丁基-5-碘-1H-吡唑

*3-(tert-Butyl)-5-iodo-1H-pyrazole*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	3-(tert-Butyl)-5-iodo-1H-pyrazole
中文名称	3-叔丁基-5-碘-1H-吡唑
CAS 号	1218791-05-9
分子式	C <sub>7</sub> H <sub>11</sub> IN <sub>2</sub>
分子量	250.08
纯度	≥ 96%

## 产品说明

### 3-(叔丁基)-5-碘-1H-吡唑产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 3-(tert-Butyl)-5-iodo-1H-pyrazole, 中文名为 3-叔丁基-5-碘-1H-吡唑, CAS 号为 1218791-05-9。其分子式为 C<sub>7</sub>H<sub>11</sub>IN<sub>2</sub>, 分子量为 250.08, 纯度 ≥96%。该化合物为白色至淡黄色结晶性粉末, 属于吡唑类衍生物, 具有碘取代基和叔丁基修饰的独特结构, 在有机合成和药物化学中表现出显著的反应活性。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为吡唑类化合物的关键中间体, 3-叔丁基-5-碘-1H-吡唑可通过卤素交换反应或偶联反应进一步功能化。其碘原子可作为反应位点参与 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等交叉偶联反应, 而叔丁基的立体位阻效应可调节反应选择性。该结构在构建杂环化合物、配体设计及生物活性分子合成中具有重要价值。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于医药研发、材料科学及农用化学品领域。在药物化学中, 常用于合成激酶抑制剂、抗炎剂或抗肿瘤先导化合物; 在配体化学中, 可作为金属催化剂的配体前体; 此外, 还可用于荧光探针或功能材料的修饰。具体用途需结合实验设计, 建议参考相关文献优化反应条件。

#### 4. 储存条件与使用建议

产品需避光密封保存于 -20° C 至 4° C 干燥环境中, 长期储存建议充入惰性气体。开封后需尽快使用, 避免反复冻融或暴露于潮湿空气。使用时应在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、二氯甲烷等有机溶剂, 水溶性较差。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, 批次间质量稳定。安全数据表明, 其可能对眼睛、皮肤及呼吸系统造成刺激, 操作时应避免直接接触。如发生泄漏, 需用惰性吸附材

料处理并按规定处置废弃物。安全术语参考 H315-H319-H335（造成皮肤/眼刺激，可能引起呼吸道刺激），建议在 MSDS 指导下规范使用。

注：本说明基于现有研究数据，具体应用需结合实验验证。如需进一步技术支持，请联系专业化学品供应商或研发团队。