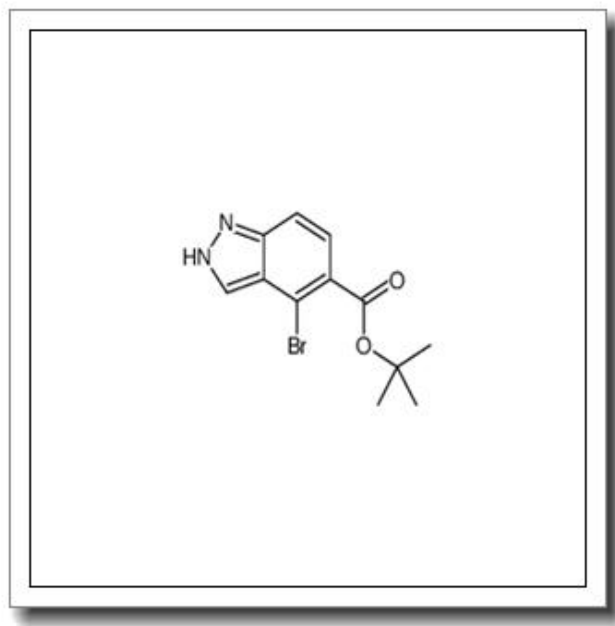


4-溴-1H-吡唑-5-羧酸叔丁酯

tert-butyl 4-bromo-1H-indazole-5-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 4-bromo-1H-indazole-5-carboxylate
中文名称	4-溴-1H-吡唑-5-羧酸叔丁酯
CAS 号	1203662-37-6
分子式	C ₁₂ H ₁₃ BrN ₂ O ₂
分子量	297.148
纯度	≥96%

产品说明

4-溴-1H-吡唑-5-羧酸叔丁酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-溴-1H-吡唑-5-羧酸叔丁酯（化学名称：tert-butyl 4-bromo-1H-indazole-5-carboxylate）是一种重要的吡唑类衍生物，CAS 号为 1203662-37-6，分子式为 C₁₂H₁₃BrN₂O₂，分子量为 297.148。该化合物为白色至浅黄色结晶性粉末，纯度 ≥96%，具有显著的化学稳定性和良好的溶解性，可溶于常见有机溶剂如二甲基亚砜（DMSO）、甲醇和乙腈。其结构中的溴原子和羧酸叔丁酯基团为后续衍生化反应提供了关键位点。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡唑类化合物的典型代表，该产品在药物化学和生物化学领域具有重要价值。吡唑骨架是多种生物活性分子的核心结构，广泛参与激酶抑制、信号通路调控等过程。溴原子的引入增强了其作为中间体的反应活性，可用于 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等交叉偶联反应，而叔丁酯基团则为羧酸官能团的保护形式，便于后续脱保护生成活性羧酸衍生物。

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。在药物发现中，它是构建抗肿瘤、抗炎及中枢神经系统药物的重要中间体，尤其适用于蛋白激酶抑制剂的结构修饰。在材料科学中，可用于合成功能化配体或光电材料前体。具体用途包括但不限于：作为关键片段用于小分子库构建、靶向药物分子的结构优化以及复杂杂环化合物的合成。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光密封保存，长期储存需置于惰性气体（如氩气）环境中以保持稳定性。使用前需恢复至室温并避免反复冻融。操作时应在通风良好的实验室环境中佩戴防护手套、护目镜及实验服，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解推荐使用高纯度有机溶剂，并确保反应体系无水无氧以提高反应效率。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 及质谱严格检测，确保纯度与结构符合标准。安全数据表明，其可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性，安全术语代码包含 S22（勿吸入粉尘）、S24/25（避免接触皮肤和眼睛）。废弃物处置需遵守当地法规，不可直接排入环境。如需进一步毒理学数据或技术支持，请联系专业化学品供应商或查阅相关 MSDS 文件。