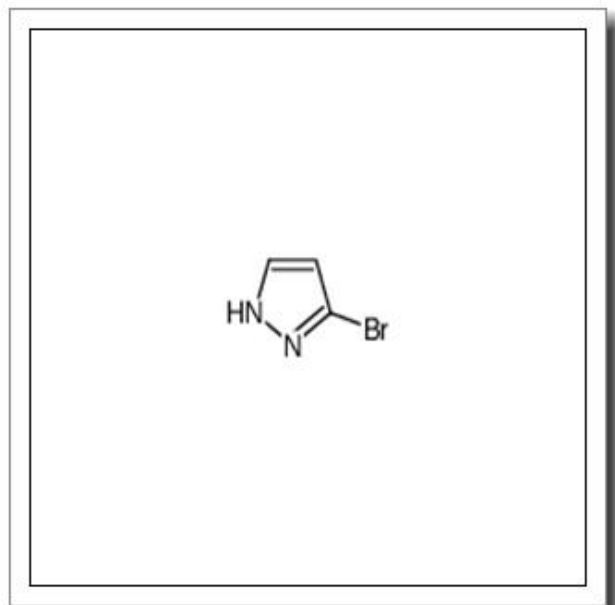


5-Bromo-1H-pyrazole

5-Bromo-1H-pyrazole



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-Bromo-1H-pyrazole
中文名称	5-溴-1H-吡唑
CAS 号	1174132-74-1
分子式	C ₃ H ₃ BrN ₂
分子量	146.973
纯度	≥96%

产品说明

5-溴-1H-吡唑产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-溴-1H-吡唑 (5-Bromo-1H-pyrazole) 是一种含溴杂环化合物, 化学式为 $C_3H_3BrN_2$, 分子量 146.973, CAS 号为 1174132-74-1。本品为白色至浅黄色结晶或粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有吡唑环的典型化学性质, 包括亲核取代反应和金属催化偶联反应的活性。溴原子的引入增强了其作为有机合成中间体的反应多样性, 尤其在构建复杂杂环结构时表现突出。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡唑类衍生物, 5-溴-1H-吡唑是药物化学和农药研发中的关键砌块。其结构中的溴原子可作为功能化位点, 通过交叉偶联反应引入其他官能团。在生物活性分子设计中, 吡唑环常作为药效团参与氢键形成和疏水相互作用, 影响靶标蛋白的结合能力。该化合物在激酶抑制剂、抗炎药物及抗菌剂研发中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

5-溴-1H-吡唑主要用于以下领域:

医药研发: 作为合成抗肿瘤、抗病毒化合物的中间体, 例如用于制备 JAK 激酶抑制剂前体。

农药化学: 参与构建新型杀虫剂和杀菌剂的杂环核心结构。

材料科学: 用于合成有机发光二极管 (OLED) 中的电子传输材料。

实验室研究: 作为金属有机框架 (MOF) 合成的配体或功能化试剂。

4. 储存条件与使用建议

储存条件: 需密封保存于干燥、避光环境中, 建议温度 $2-8^{\circ}C$, 长期储存应充惰性气体保护。

使用建议: 操作时佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩, 避免吸入或皮肤接触。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇, 推荐在通风橱中使用有机溶剂配制溶液。

5. 质量控制与安全信息

质量控制：通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，水分含量 $\leq 0.5\%$ ，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。

安全信息：本品对眼睛和呼吸道有刺激性，CAS 号 1174132-74-1 对应的 GHS 分类为 H315-H319-H335，应急处置需参照 MSDS 操作。废弃处理应遵循当地化学品管理法规，不可直接排入环境。

本产品仅供科研用途，不适用于医药或食品领域。使用者应具备有机化学实验经验，并严格遵守实验室安全规范。