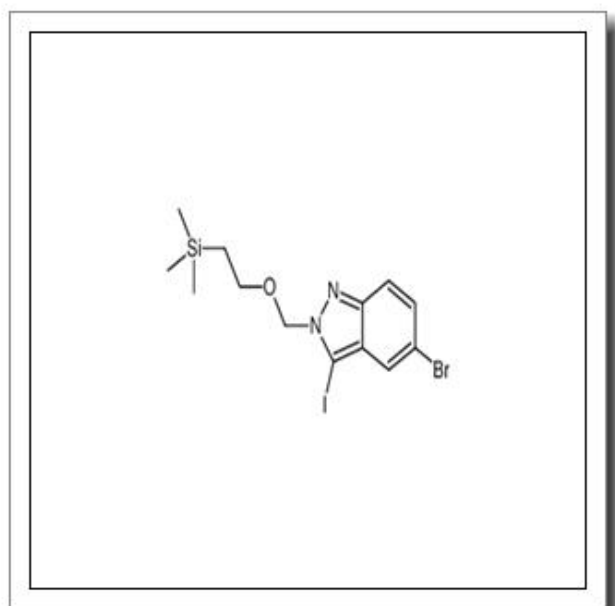


5-bromo-3-iodo-2-(2-trimethylsilyl-ethoxymethyl)-1H-indazole

5-bromo-3-iodo-2-(2-trimethylsilyl-ethoxymethyl)-1H-indazole



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-bromo-3-iodo-2-(2-trimethylsilyl-ethoxymethyl)-1H-indazole
中文名称	5-bromo-3-iodo-2-(2-trimethylsilyl-ethoxymethyl)-1H-indazole
CAS 号	1012104-27-6
分子式	C ₁₃ H ₁₈ BrIN ₂ OSi
分子量	453.189
纯度	≥ 96%

产品说明

5-溴-3-碘-2-(2-三甲基硅烷基-乙氧基甲基)-1H-吡唑产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 5-bromo-3-iodo-2-(2-trimethylsilylanyl-ethoxymethyl)-1H-indazole，CAS 号 1012104-27-6，分子式 $C_{13}H_{18}BrIN_2OSi$ ，分子量 453.189。纯度 $\geq 96\%$ (HPLC 测定)，具有明确的吡唑骨架结构，溴和碘原子的引入增强了其反应活性，而三甲基硅烷基乙氧基甲基 (SEM) 保护基团可提高化合物的稳定性。该物质易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、二氯甲烷等有机溶剂，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡唑类衍生物，该化合物是药物化学和有机合成中的关键中间体，尤其适用于构建含氮杂环结构。其溴和碘官能团可作为后续偶联反应 (如 Suzuki、Buchwald-Hartwig 反应) 的活性位点，SEM 保护基则便于在合成后期选择性脱保护。在激酶抑制剂和抗肿瘤药物研发中，此类结构常作为核心骨架参与靶点结合。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于以下领域：

- (1) 医药研发：作为小分子抑制剂的前体，用于探索癌症、炎症等疾病的治疗靶点；
- (2) 有机合成：通过卤素-金属交换或交叉偶联反应制备复杂杂环化合物；
- (3) 材料科学：用于合成光电功能材料的中间体。典型应用包括与硼酸衍生物偶联合成多取代吡唑库，或作为蛋白激酶抑制剂的合成模块。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、避光、干燥惰性气体 (如氩气) 环境下长期储存。开封后需充氮密封，避免反复冻融。使用前需恢复至室温并短暂离心。溶解时优先选用无水 DMSO，配制成母液后分装保存。操作需在通风橱中进行，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 和质谱严格验证，符合批次一致性标准。安全数据表明其具有刺激性，可能引起皮肤和眼睛损伤（GHS 分类：H315-H319）。建议佩戴防护手套、护目镜及实验服操作，若接触皮肤应立即用大量清水冲洗。废弃物需按危险化学品规范处置。详细毒理学数据可参考随附的 MSDS 报告。

注：本说明仅限科研用途，不适用于诊断或治疗。使用者应具备专业化学知识并遵守实验室安全规程。