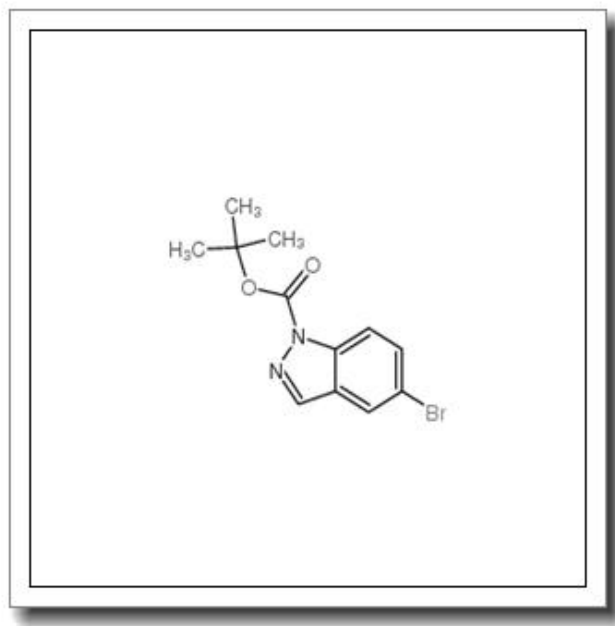


5-溴-1H-吡唑-1-羧酸叔丁酯

Tert-Butyl 5-bromo-3-methyl-1H-indazole-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Tert-Butyl 5-bromo-3-methyl-1H-indazole-1-carboxylate
中文名称	5-溴-1H-吡唑-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	552331-49-4
分子式	C ₁₂ H ₁₃ BrN ₂ O ₂
分子量	297.148
纯度	≥96%

产品说明

5-溴-1H-吡唑-1-羧酸叔丁酯产品说明书

产品概述与化学特性

5-溴-1H-吡唑-1-羧酸叔丁酯 (Tert-Butyl 5-bromo-3-methyl-1H-indazole-1-carboxylate) 是一种重要的有机中间体, CAS 号为 552331-49-4, 分子式为 $C_{12}H_{13}BrN_2O_2$, 分子量为 297.148。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有吡唑环结构, 其叔丁酯基团和溴原子赋予其独特的反应活性, 适合作为医药和材料化学中的关键合成砌块。

生物化学功能与重要性

作为吡唑类衍生物, 该化合物在生物活性分子设计中具有显著价值。吡唑环是许多药物分子的核心结构, 5 位溴原子可作为后续偶联反应的活性位点, 而叔丁酯基团则提供了良好的保护基特性。其在激酶抑制剂、抗肿瘤药物和神经科学研究工具分子的合成中展现出重要潜力, 是构建复杂生物活性分子的理想前体。

主要应用领域与具体用途

1. 医药研发: 用于小分子靶向药物的结构修饰, 特别是蛋白激酶抑制剂的合成。
2. 材料科学: 作为有机光电材料的合成中间体。
3. 学术研究: 在金属催化偶联反应 (如 Suzuki 偶联) 中作为标准底物。
4. 农药化学: 用于开发新型农用化学品活性成分。

储存条件与使用建议

本品应密封保存于 2-8°C 的干燥环境中, 避免光照和潮湿。开封后建议充氮保护, 并在 6 个月内使用完毕。操作时需在通风橱中进行, 佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 微溶于醇类, 不溶于水。

质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 重金属含量 $< 10\text{ppm}$ 。安全数据表明, 该化合物可能引起眼睛和皮肤刺激, 操作时应避免直接接触。如不慎接触, 立即用大量清水冲洗。

并就医。废弃物处理需符合当地化学品处置法规，建议通过专业化学品回收公司处理。

（注：本说明基于当前研究数据编制，具体应用需结合实验条件优化。产品规格可能因批次略有差异，以实际质检报告为准。）