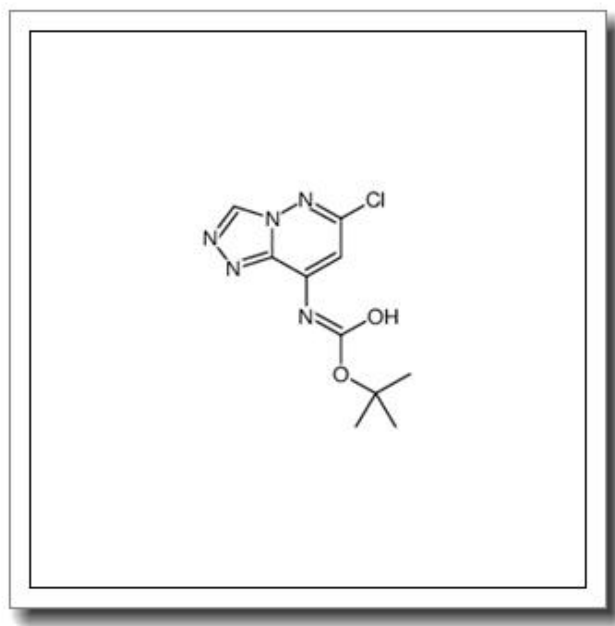


tert-butyl N-(6-chloro-[1,2,4]triazolo[4,3-b]pyridazin-8-yl)carbamate

tert-butyl N-(6-chloro-[1,2,4]triazolo[4,3-b]pyridazin-8-yl)carbamate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl N-(6-chloro-[1,2,4]triazolo[4,3-b]pyridazin-8-yl)carbamate
中文名称	tert-butyl N-(6-chloro-[1,2,4]triazolo[4,3-b]pyridazin-8-yl)carbamate
CAS 号	1263425-79-1
分子式	C ₁₀ H ₁₂ ClN ₅ O ₂
分子量	269.688
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 tert-butyl N-(6-chloro-[1,2,4]triazolo[4,3-b]pyridazin-8-yl)carbamate, 中文名称为 N-(6-氯-[1,2,4]三唑并[4,3-b]哒嗪-8-基)氨基甲酸叔丁酯, CAS 号为 1263425-79-1。其分子式为 C₁₀H₁₂ClN₅O₂, 分子量为 269.688, 纯度 ≥96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 具有三唑并哒嗪骨架结构, 兼具氯取代基和叔丁氧羰基保护基团, 表现出良好的化学稳定性和反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为三唑并哒嗪类衍生物, 该化合物在药物化学和生物化学领域具有重要价值。其结构中的三唑环和哒嗪环可作为药效团参与氢键形成和 $\pi-\pi$ 堆积相互作用, 而氯原子的引入可调节分子亲脂性。叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团使其在有机合成中易于进行后续脱保护反应, 是构建复杂杂环化合物的重要中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药研发领域, 特别适用于抗肿瘤、抗病毒及中枢神经系统药物的合成。其可作为激酶抑制剂的骨架结构, 用于设计靶向性小分子药物。在农药化学中, 也可作为先导化合物用于新型杀虫剂和杀菌剂的开发。实验室中常用于杂环化合物的结构修饰和活性研究。

4. 储存条件与使用建议

建议在 2-8°C 的干燥环境中避光保存, 长期储存需充惰性气体保护。开封后应尽快使用, 避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤和眼睛。溶解性测试表明, 本品易溶于二甲基亚砜 (DMSO), 微溶于甲醇和乙醇, 不溶于水。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 ≥96%, 批次间质量稳定。MS 和 NMR 谱图验证结构准确性。安全数据表明, 该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时应佩戴防护手套和护目镜。如意外接触, 立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地化学品管理法规。

本品仅供科研使用，不适用于临床或家庭用途。建议使用者在充分了解其化学性质和安全规范的前提下进行实验操作。