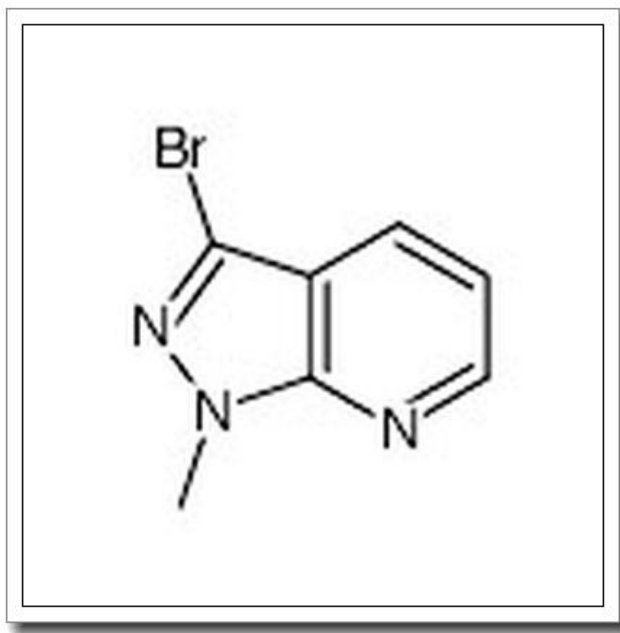


3-溴-1-甲基-1H-吡唑并[3,4-b]吡啶

3-bromo-1-methylpyrazolo[3,4-b]pyridine



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-bromo-1-methylpyrazolo[3,4-b]pyridine
中文名称	3-溴-1-甲基-1H-吡唑并[3,4-b]吡啶
CAS 号	116855-03-9
分子式	C ₇ H ₆ BrN ₃
分子量	212.047
纯度	>96%

产品说明

产品名称: 3-溴-1-甲基-1H-吡唑并[3,4-b]吡啶

英文名称: 3-bromo-1-methylpyrazolo[3,4-b]pyridine

CAS 号: 116855-03-9

分子式: C₇H₆BrN₃

分子量: 212.047

纯度: >96%

1. 产品概述与化学特性

3-溴-1-甲基-1H-吡唑并[3,4-b]吡啶是一种含溴杂环化合物,属于吡唑并吡啶类衍生物。其分子结构包含吡唑环与吡啶环的稠合体系,溴原子位于吡唑环的3位,甲基取代基位于1位氮原子上。该化合物为白色至淡黄色结晶或粉末,具有较高的化学稳定性,可溶于常见有机溶剂(如二甲基亚砜、甲醇、乙醇等),但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡唑并吡啶类化合物的关键中间体,3-溴-1-甲基-1H-吡唑并[3,4-b]吡啶在药物化学和材料科学领域具有重要价值。其结构中的溴原子可作为活性位点参与偶联反应(如Suzuki偶联、Buchwald-Hartwig胺化等),而吡唑并吡啶骨架是多种生物活性分子的核心结构,常见于激酶抑制剂、抗肿瘤药物及神经调节剂的研发中。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于以下领域:

- 医药研发: 作为构建块用于合成靶向抗癌药物(如ALK抑制剂)和抗炎药物。
- 材料科学: 用于制备有机发光二极管(OLED)中的电子传输材料或配体前体。
- 农药化学: 作为杂环类农药的中间体,参与新型杀虫剂或杀菌剂的开发。

4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光条件下储存,温度控制在2-8°C(长期储存)或室温(短期使用)。开封后需充惰性气体(如氮气)保护,避免吸湿和氧化。使用时应在通风橱

中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解推荐使用无水有机溶剂，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

本产品通过 HPLC 检测，纯度>96%（面积归一化法）。MS 和 ¹H NMR 数据可提供验证。

安全提示：该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性，操作时需佩戴防护手套、护目镜和防尘口罩。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照国家危险化学品处理规范处置。

（注：以上信息基于现有数据，具体应用需结合实验条件进一步验证。）