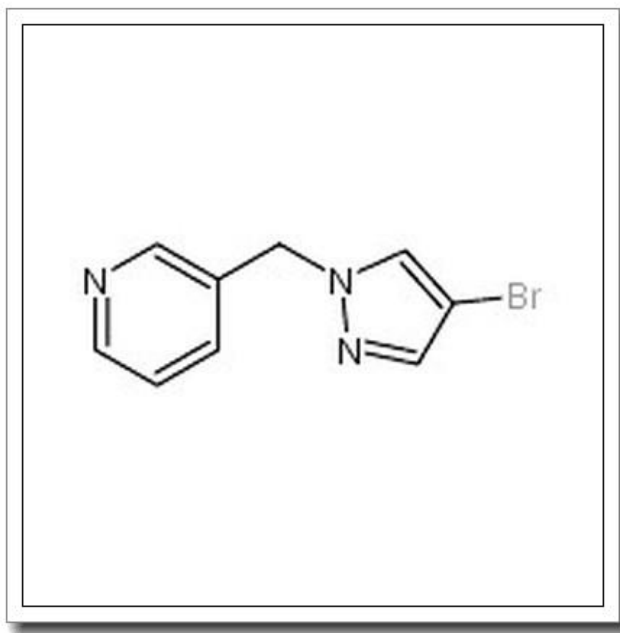


# 4-溴-1-(吡啶-3-甲基)吡唑

*3-[(4-bromopyrazol-1-yl)methyl]pyridine*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	3-[(4-bromopyrazol-1-yl)methyl]pyridine
中文名称	4-溴-1-(吡啶-3-甲基)吡唑
CAS 号	850349-24-5
分子式	C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> BrN <sub>3</sub>
分子量	238.084
纯度	>96%

## 产品说明

### 3-[(4-溴吡唑-1-基)甲基]吡啶产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 3-[(4-bromopyrazol-1-yl)methyl]pyridine, 中文别名 4-溴-1-(吡啶-3-甲基)吡唑, CAS 号为 850349-24-5, 分子式 C<sub>9</sub>H<sub>8</sub>BrN<sub>3</sub>, 分子量 238.084。外观为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 ≥96% (HPLC 测定)。该化合物属于吡唑并吡啶类衍生物, 结构中含溴取代基与吡啶杂环, 具有显著的电子效应和空间位阻特性, 易溶于二甲基亚砷 (DMSO) 和甲醇, 微溶于水 (25℃时溶解度 <0.1 mg/mL)。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为杂环化合物的重要中间体, 其吡唑环与吡啶环的协同作用使其在配位化学和药物化学中具有独特价值。溴原子的引入增强了分子亲电性, 可作为 Suzuki 偶联等交叉偶联反应的活性位点。此外, 该结构单元常见于激酶抑制剂和抗肿瘤药物的研发中, 尤其在靶向蛋白激酶的分子设计中表现突出。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于以下领域:

- 医药研发: 作为小分子抑制剂的核心骨架, 用于构建抗炎、抗肿瘤候选化合物。
- 材料科学: 作为有机配体参与金属有机框架 (MOF) 材料的合成。
- 农药化学: 用于开发新型杀虫剂和杀菌剂的中间体。

实验室研究中, 建议以 5-10 mM 浓度溶于 DMSO 配制母液, 后续用缓冲液稀释至工作浓度。

#### 4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃、避光、干燥的惰性气体 (如氩气) 环境中, 有效期 24 个月。开封后建议分装使用以避免反复冻融。操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩, 在通风橱中进行称量。溶解性测试表明, 其在水系缓冲液中易析出, 建议优先使用有机溶剂体系。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 及质谱三重验证，符合 ACS 级标准。MSDS 数据显示其急性毒性（LD50 大鼠口服）>500 mg/kg，但可能对眼睛和呼吸道黏膜产生刺激。废弃处置需遵循危险化学品规范，不可直接排入下水道。如发生泄漏，需用惰性吸附材料（如硅藻土）覆盖后收集，并交由专业机构处理。

注：以上数据基于实验室环境测试，实际应用需根据具体实验条件优化。