

4-溴-7-氰基吲哚

4-Bromo-1H-indole-7-carbonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-Bromo-1H-indole-7-carbonitrile
中文名称	4-溴-7-氰基吲哚
CAS 号	1167055-46-0
分子式	C ₉ H ₅ BrN ₂
分子量	221.053
纯度	>96%

产品说明

4-溴-7-氰基吲哚产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-溴-7-氰基吲哚 (4-Bromo-1H-indole-7-carbonitrile) 是一种重要的吲哚类衍生物，化学式为 $C_9H_5BrN_2$ ，分子量 221.053，CAS 号 1167055-46-0。本品为白色至淡黄色结晶性粉末，纯度 >96%，兼具溴原子和氰基的独特结构，使其在有机合成中表现出高反应活性。其吲哚骨架与极性官能团的结合，赋予其良好的溶解性，可溶于二甲基亚砜 (DMSO)、甲醇等有机溶剂。

2. 生物化学功能与重要性

作为吲哚类化合物的修饰衍生物，4-溴-7-氰基吲哚是构建复杂生物活性分子的关键中间体。其溴原子易发生亲核取代反应，氰基则可进一步转化为羧酸、酰胺等官能团，在药物化学中广泛用于激酶抑制剂、抗肿瘤及抗炎药物的研发。此外，其结构特征对研究蛋白质-配体相互作用具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药和农药中间体合成，具体包括：1) 作为 EGFR、CDK 等靶点抑制剂的合成前体；2) 用于构建含吲哚骨架的天然产物类似物；3) 在荧光探针开发中作为信号基团修饰载体。实验室研究中，常通过 Suzuki 偶联等反应引入芳基或杂环结构。

4. 储存条件与使用建议

储存于 $-20^{\circ}C$ 避光干燥环境中，长期保存建议充氮密封。使用时需在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明，推荐使用 DMSO 配制母液 (浓度 ≤ 10 mM)，现配现用以防降解。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 和 NMR 确保纯度 >96%，批次间稳定性控制在 $\pm 1\%$ 。本品属于刺激性化学品，CAS 号 1167055-46-0，危险代码 H302/H315/H319，需佩戴防护手套及护目镜。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法规。

注：本产品仅限科研用途，不可用于人体或食品相关领域。技术参数可能因批次微调，请以随货 COA 为准。