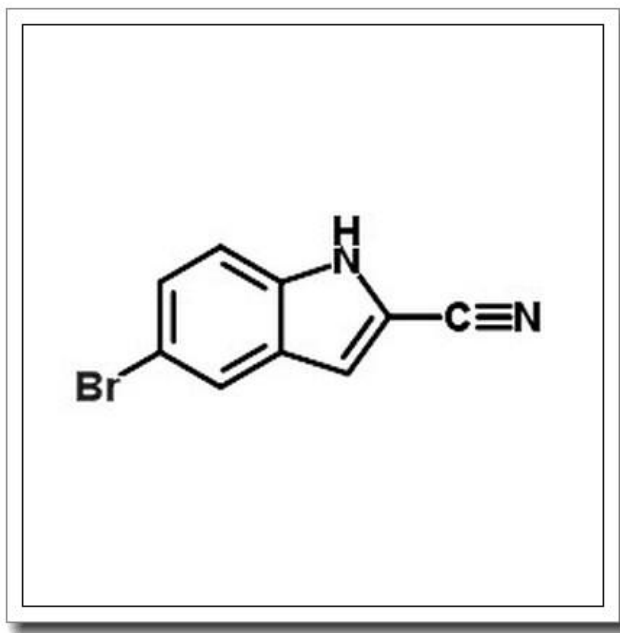


# 5-溴-1H-吲哚-2-甲腈

*5-Bromo-1H-indole-2-carbonitrile*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	5-Bromo-1H-indole-2-carbonitrile
中文名称	5-溴-1H-吲哚-2-甲腈
CAS 号	902772-13-8
分子式	C <sub>9</sub> H <sub>5</sub> BrN <sub>2</sub>
分子量	221.053
纯度	>96%

## 产品说明

### 5-溴-1H-吲哚-2-甲腈产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

5-溴-1H-吲哚-2-甲腈（英文名称：5-Bromo-1H-indole-2-carbonitrile）是一种含溴取代基的吲哚类化合物，CAS 号为 902772-13-8，分子式为  $C_9H_5BrN_2$ ，分子量为 221.053。该化合物为白色至淡黄色结晶性粉末，纯度高于 96%，具有良好的化学稳定性。其结构中的溴原子和氰基赋予其独特的反应活性，可作为有机合成中的重要中间体。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物是吲哚衍生物家族中的关键成员，吲哚骨架广泛存在于天然生物活性分子中。溴原子的引入增强了其亲电取代反应能力，而氰基则提供了进一步官能团转化的位点。在药物化学领域，此类结构常作为激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂的构建模块，具有潜在的生物活性研究价值。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

5-溴-1H-吲哚-2-甲腈主要用于医药研发和有机合成领域。具体用途包括：1) 作为抗肿瘤或抗炎药物先导化合物的合成前体；2) 用于构建复杂杂环体系的中间体；3) 在材料科学中用于制备功能性有机分子。其高反应活性使其在 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等交叉偶联反应中表现优异。

#### 4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于干燥、避光环境中，推荐储存温度为 2-8°C。长期储存建议充入惰性气体保护。使用时应穿戴防护手套和护目镜，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明，该化合物易溶于二甲基亚砜（DMSO）和 N,N-二甲基甲酰胺（DMF），微溶于甲醇和乙醇。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ ，同时提供核磁共振（NMR）和质谱（MS）数据以确证结构。安全信息提示：该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应在通风

橱中进行。如发生接触，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管理法规，不可直接排放至环境中。

本产品仅供科研用途，不适用于药品、食品或家庭用途。具体应用前请查阅相关文献并评估适用性。