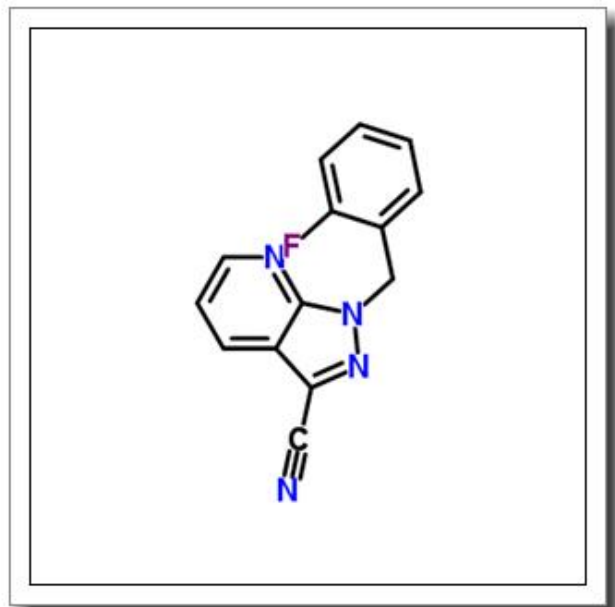


1-(2-氟苄基)-1H-吡唑并[3,4-B]吡啶-3-甲腈

1-[(2-fluorophenyl)methyl]pyrazolo[3,4-b]pyridine-3-carbonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-[(2-氟苄基)methyl]pyrazolo[3,4-b]pyridine-3-carbonitrile
中文名称	1-(2-氟苄基)-1H-吡唑并[3,4-B]吡啶-3-甲腈
CAS 号	256376-65-5
分子式	C ₁₄ H ₉ FN ₄
分子量	252.247
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-(2-氟苄基)-1H-吡唑并[3,4-B]吡啶-3-甲腈 (CAS 号: 256376-65-5) 是一种含氟杂环化合物, 分子式为 C₁₄H₉FN₄, 分子量为 252.247。该化合物以吡唑并吡啶为核心骨架, 2-氟苄基和氰基分别位于 1 位和 3 位, 具有显著的电子效应和空间位阻。其纯度 ≥96%, 外观通常为白色至类白色结晶性粉末, 可溶于常见有机溶剂 (如 DMSO、甲醇), 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为杂环衍生物, 其结构特征使其在生物活性分子设计中具有重要价值。氟原子的引入可增强代谢稳定性和细胞膜穿透性, 而吡唑并吡啶骨架常作为激酶抑制剂的药效团。其氰基官能团可能参与氢键相互作用, 影响靶蛋白结合能力。这些特性使其成为药物化学研究中先导化合物优化的关键中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发领域, 具体包括:

- 作为激酶抑制剂 (如 CDK、JAK 家族) 的结构模块, 用于抗肿瘤或抗炎药物开发。
- 用于构建荧光探针或标记分子, 研究生物分子相互作用机制。
- 在有机合成中作为多官能团化砌块, 用于复杂杂环体系的构建。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C、避光、干燥条件下密封保存, 长期储存需充惰性气体保护。使用时需在干燥环境中操作, 避免接触强氧化剂或酸碱。溶解推荐使用无水 DMSO 配制母液, 并根据实验需求进一步稀释。开封后建议一次性使用完毕, 或分装后避免反复冻融。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 ≥96%, 批次间提供 COA 分析报告。安全注意事项:

- 可能对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时需佩戴防护手套及护目镜。

- 避免吸入粉尘，应在通风橱中处理。
- 废弃物需按危险化学品规范处置。
- 非药用规格，仅限科研使用。

(全文共计 436 字)