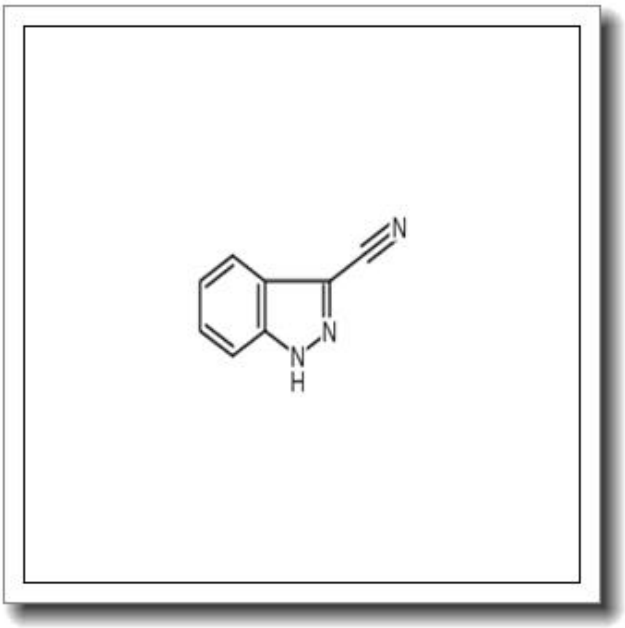
1H-吲唑-3-甲腈

3-Cyano-1H-indazole



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-Cyano-1H-indazole
中文名称	1H-吲唑-3-甲腈
CAS 号	50264-88-5
分子式	C8H5N3
分子量	143.145
纯度	≧96%

产品说明

1H-吲唑-3-甲腈（3-Cyano-1H-indazole）产品说明书

1. 产品概述与化学特性

1H-吲唑-3-甲腈是一种含氮杂环化合物，化学名称为3-Cyano-1H-indazole，CAS号为50264-88-5。其分子式为C8H5N3，分子量为143.145，纯度不低于96%。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在，具有吲唑环结构，并在3位带有氰基官能团，赋予其独特的化学反应性和生物活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为吲唑类衍生物，1H-吲唑-3-甲腈是药物化学和有机合成中的重要中间体。其结构中的吲唑环和氰基可参与多种亲核取代、环化及偶联反应，广泛应用于激酶抑制剂、抗肿瘤药物及抗炎药物的研发。该化合物在调节细胞信号通路中表现出潜在活性，尤其在蛋白激酶靶点研究中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

1H-吲唑-3-甲腈主要用于医药研发领域，具体包括：

- 作为小分子药物先导化合物的核心骨架，用于优化活性与选择性。
- 用于合成激酶抑制剂（如JAK、CDK等靶点），在癌症治疗研究中具有潜力。
- 在材料科学中，可作为荧光探针或配体合成的起始原料。

4. 储存条件与使用建议

为确保稳定性，本品应密封保存于干燥、避光环境中，推荐储存温度为2-8℃。开封后需充入惰性气体（如氮气）保护，避免吸湿或氧化。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，该化合物易溶于二甲基亚砜（DMSO），微溶于甲醇、乙醇等极性溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品经HPLC检测纯度≥96%，并提供COA（质量分析证书）。安全数据表明，其可能对眼睛、皮肤及呼吸系统造成刺激，操作时应佩戴防护手套、护目镜及口罩。若发生接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。

本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合用户实验条件进一步验证。