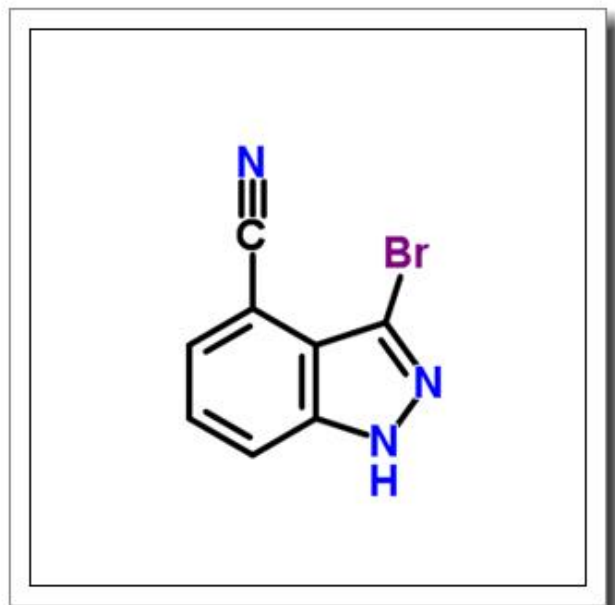


3-bromo-2H-indazole-4-carbonitrile

3-bromo-2H-indazole-4-carbonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-bromo-2H-indazole-4-carbonitrile
中文名称	3-bromo-2H-indazole-4-carbonitrile
CAS 号	1000341-36-5
分子式	C ₈ H ₄ BrN ₃
分子量	222.042
纯度	≥96%

产品说明

3-bromo-2H-indazole-4-carbonitrile 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-bromo-2H-indazole-4-carbonitrile (CAS 号: 1000341-36-5) 是一种溴代吡唑类衍生物, 分子式为 $C_8H_4BrN_3$, 分子量为 222.042。该化合物为白色至淡黄色结晶性粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有显著的芳香杂环结构特征。其化学结构中包含溴原子和氰基官能团, 赋予其独特的反应活性, 尤其在亲电取代和偶联反应中表现出高选择性。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡唑类化合物的关键中间体, 3-bromo-2H-indazole-4-carbonitrile 在药物化学和材料科学领域具有重要价值。其吡唑核心结构能够模拟生物体内嘌呤碱基的配体结合特性, 常用于激酶抑制剂和抗癌药物的研发。溴原子的引入进一步增强了其作为合成砌块的灵活性, 可通过交叉偶联反应构建复杂分子骨架。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发和有机合成领域。在药物发现中, 它是构建 EGFR、CDK 等靶点抑制剂的重要前体; 在材料科学中, 可用于合成荧光探针或光电材料。此外, 其氰基官能团可作为进一步修饰的位点, 例如水解为羧酸或还原为胺基, 扩展了其在结构衍生化中的应用潜力。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、避光、干燥条件下长期储存, 短期使用可存放于 $2-8^{\circ}C$ 环境。开封后需充惰性气体 (如氮气) 保护, 避免吸湿和氧化。使用时应在通风橱中操作, 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 DMSO、DMF 等极性有机溶剂, 微溶于醇类, 水溶性较差。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行严格质量控制, 确保批次间稳定性。安全数据表明, 其急性毒性 (LD50) 为 300 mg/kg (大鼠口服), 属于有害物质, 操作时需佩

戴防护手套、护目镜及防尘口罩。如发生泄漏，需用惰性吸附材料处理，并按危险化学品废弃物处置规范处理。

（注：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优化。）