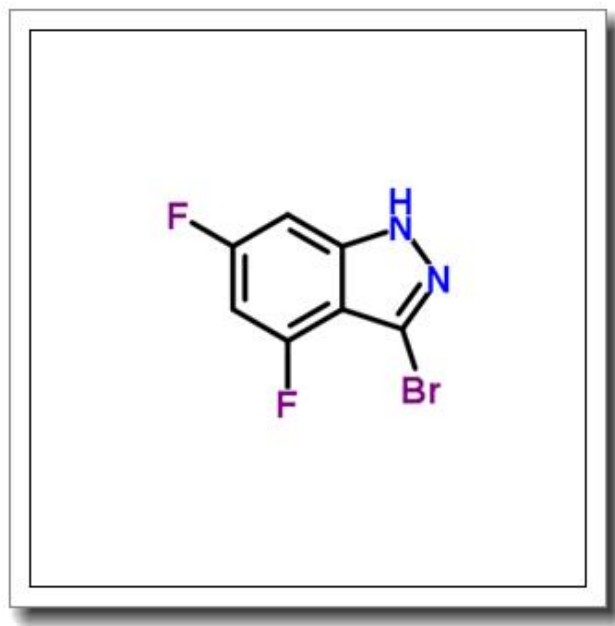


3-溴-4,6-二氟-1H-吡唑

3-bromo-4,6-difluoro-2H-indazole



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-bromo-4,6-difluoro-2H-indazole
中文名称	3-溴-4,6-二氟-1H-吡唑
CAS 号	887567-78-4
分子式	C ₇ H ₃ BrF ₂ N ₂
分子量	233.013
纯度	≥ 96%

产品说明

3-溴-4,6-二氟-1H-吡唑产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 3-bromo-4,6-difluoro-2H-indazole, 是一种含卤素取代的吡唑类化合物。其 CAS 号为 887567-78-4, 分子式 $C_7H_3BrF_2N_2$, 分子量 233.013, 外观通常为白色至类白色结晶粉末。结构中溴原子和氟原子的引入显著增强了分子的电子效应和空间位阻, 使其成为有机合成中重要的中间体。纯度标准 $\geq 96\%$ (HPLC 测定), 熔点在 185-189°C 范围内。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物通过吡唑骨架的氮杂环结构与生物靶标产生特异性相互作用, 溴原子和氟原子的协同效应可调节分子的脂溶性和细胞膜穿透性。在激酶抑制研究中表现出潜在活性, 其结构特征使其成为设计蛋白激酶抑制剂的关键药效团。分子中的卤素位点为进一步衍生化提供了修饰位点。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域, 特别是作为抗肿瘤药物和抗炎药物的核心中间体。具体用途包括: 1) 用于构建 CDK 抑制剂和 JAK 激酶抑制剂的母核结构; 2) 在 PET 显影剂开发中作为氟标记前体; 3) 作为有机催化反应的配体骨架; 4) 在材料科学中用于合成光电功能材料。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20°C、避光、干燥条件下长期储存, 短期使用可存放于 2-8°C 环境。开封后需充入惰性气体保护, 避免反复冻融。使用时应在通风橱中操作, 溶解推荐使用 DMF 或 DMSO 等极性非质子溶剂。工作浓度需根据具体实验体系进行优化, 建议先进行小剂量溶解性测试。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 和质谱三重验证, 批次间差异控制在 $\pm 2\%$ 以内。重金属含量 $< 10\text{ppm}$, 水分含量 $\leq 0.5\%$ 。安全数据: GHS 分类为刺激性物质 (Category 2), 操

作时需佩戴防护眼镜和丁腈手套。如接触皮肤，立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物应作为有害化学品处置，遵守当地环保法规。

（注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件调整。产品规格可能因批次略有差异，以实际质检报告为准。）