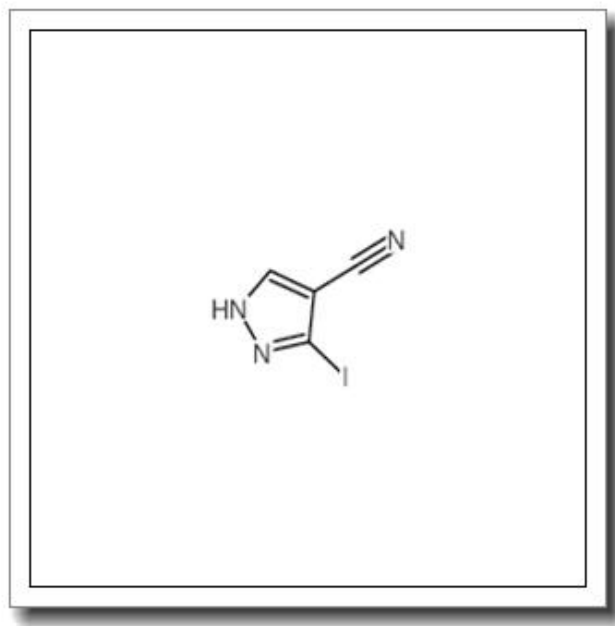


3-碘吡唑-4-甲腈

3-Iodo-1H-pyrazole-4-carbonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-Iodo-1H-pyrazole-4-carbonitrile
中文名称	3-碘吡唑-4-甲腈
CAS 号	827316-44-9
分子式	C ₄ H ₂ IN ₃
分子量	218.983
纯度	≥ 96%

产品说明

3-碘吡唑-4-甲腈 (3-Iodo-1H-pyrazole-4-carbonitrile) 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-碘吡唑-4-甲腈是一种含碘杂环化合物，化学式为 $C_4H_2IN_3$ ，分子量 218.983，CAS 号为 827316-44-9。该化合物以白色至浅黄色结晶粉末形式存在，纯度 $\geq 96\%$ ，具有显著的电子亲和性和空间位阻效应。其结构中的碘原子和氰基赋予其高反应活性，可作为有机合成中的关键中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡唑类衍生物，该化合物在药物化学和材料科学中具有重要价值。碘原子的引入增强了其参与偶联反应（如 Suzuki 偶联）的能力，而氰基则提供了进一步官能团化的位点。其在抑制酶活性或调控生物分子相互作用方面的潜力，使其成为抗癌、抗炎药物研发的候选结构单元。

3. 主要应用领域与具体用途

3-碘吡唑-4-甲腈广泛应用于以下领域：

- 医药中间体：用于合成靶向激酶抑制剂或抗病毒药物。
- 材料科学：作为有机发光二极管（OLED）或液晶材料的构建模块。
- 农用化学品：参与开发新型杀虫剂或杀菌剂。
- 科研工具：在金属有机化学中作为配体前体或标记分子。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、避光、干燥惰性气体（如氩气）环境下密封保存，避免与氧化剂或强酸接触。使用前需恢复至室温并确保通风良好。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜（DMSO），部分溶于甲醇，水溶性较低。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 验证纯度 $\geq 96\%$ ，批号关联完整分析证书（COA）。操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩，避免吸入或皮肤接触。安全数据表（SDS）显示其可

能导致眼睛和皮肤刺激，应急处理需用大量清水冲洗并就医。废弃物应作为有害化学废料处置，遵守当地法规。

注：本说明基于现有研究数据，实际应用前请进行充分验证。