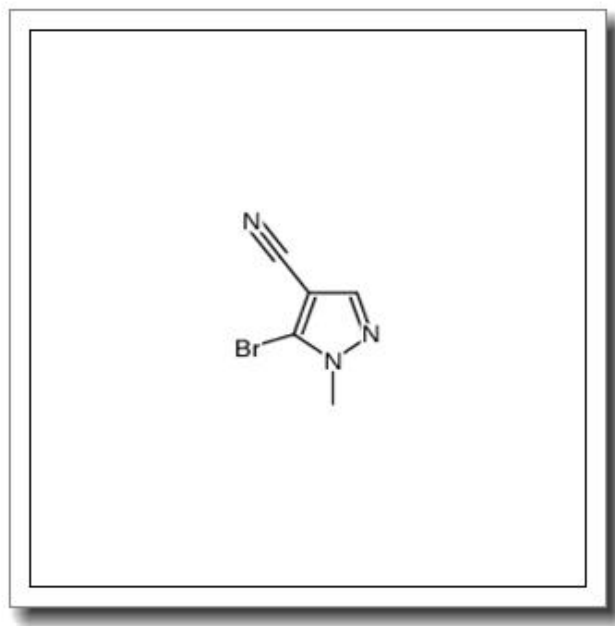


5-溴-1-甲基-1H-吡唑-4-甲腈

5-bromo-1-methylpyrazole-4-carbonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-bromo-1-methylpyrazole-4-carbonitrile
中文名称	5-溴-1-甲基-1H-吡唑-4-甲腈
CAS 号	1269293-80-2
分子式	C ₅ H ₄ BrN ₃
分子量	186.009
纯度	≥96%

产品说明

产品名称: 5-溴-1-甲基-1H-吡唑-4-甲腈 (5-bromo-1-methylpyrazole-4-carbonitrile)

CAS 号: 1269293-80-2

分子式: C₅H₄BrN₃

分子量: 186.009

纯度: ≥96%

1. 产品概述与化学特性

5-溴-1-甲基-1H-吡唑-4-甲腈是一种含溴和氰基的吡唑类化合物, 具有显著的杂环结构特征。其分子式为 C₅H₄BrN₃, 分子量为 186.009, 常温下为白色至类白色结晶或粉末。该化合物在有机溶剂中 (如甲醇、乙醇、二甲基亚砷) 具有较好的溶解性, 但在水中溶解度较低。其结构中的溴原子和氰基赋予其较高的反应活性, 适用于多种有机合成反应。

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农药化学中具有重要价值。吡唑环结构是许多生物活性分子的核心骨架, 能够与生物体内的靶标蛋白 (如激酶或受体) 发生特异性相互作用。溴原子的引入可增强化合物的亲电性, 而氰基则可能参与氢键形成或作为反应位点, 因此在药物设计和先导化合物优化中具有广泛应用潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于医药中间体和农药中间体的合成。在医药领域, 可作为构建抗肿瘤、抗炎或抗感染药物分子的关键片段; 在农药领域, 常用于合成高效低毒的杀虫剂或杀菌剂。此外, 它还可作为有机合成中的砌块, 用于构建更复杂的杂环化合物或功能材料。

4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光、密闭的条件下储存, 温度保持在 2-8° C, 以延长产品稳定性。使用时需在通风良好的环境中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解时建

议使用极性有机溶剂（如 DMSO），并根据实验需求调整浓度。开封后应尽快使用，避免反复冻融或暴露于潮湿环境。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测，纯度 $\geq 96\%$ ，并提供相关质检报告（COA）。安全信息如下：

- 危险标识：可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激。
- 防护措施：操作时佩戴防护手套、护目镜和防尘口罩。
- 应急处理：如接触皮肤，立即用大量清水冲洗；如误食，请立即就医并出示产品标签。

本产品仅限科研用途，不可用于人体或动物实验。购买后请仔细阅读技术资料，并遵守实验室安全规范。