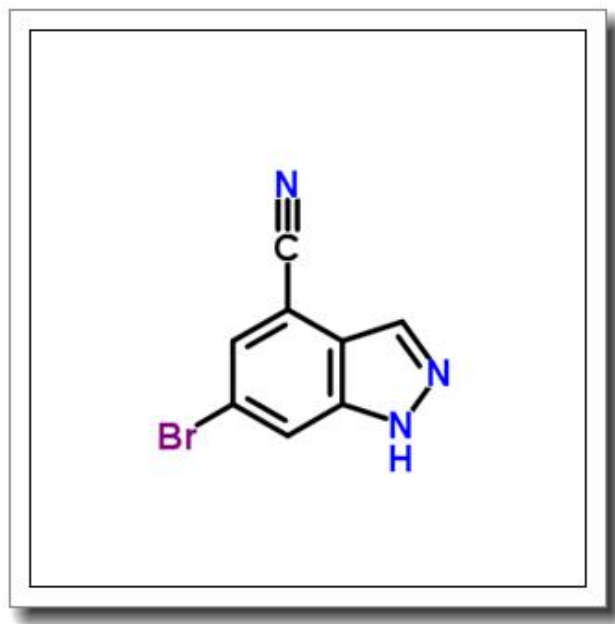


6-溴-4-氰基吲唑

6-Bromo-1H-indazole-4-carbonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	6-Bromo-1H-indazole-4-carbonitrile
中文名称	6-溴-4-氰基吲唑
CAS 号	898747-00-7
分子式	C ₈ H ₄ BrN ₃
分子量	222.042
纯度	≥ 96%

产品说明

6-溴-4-氰基吡唑产品说明书

1. 产品概述与化学特性

6-溴-4-氰基吡唑（英文名称：6-Bromo-1H-indazole-4-carbonitrile）是一种有机杂环化合物，化学式为 $C_8H_4BrN_3$ ，分子量为 222.042，CAS 号为 898747-00-7。该化合物以白色至浅黄色结晶或粉末形式存在，纯度通常不低于 96%。其结构包含吡唑环骨架，并在 6 位取代溴原子、4 位取代氰基，赋予其独特的电子效应和反应活性。该物质易溶于二甲基亚砜（DMSO）等极性有机溶剂，但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡唑类衍生物，6-溴-4-氰基吡唑是药物化学和生物化学研究中的重要中间体。吡唑环结构广泛存在于多种生物活性分子中，具有调节蛋白激酶、G 蛋白偶联受体等靶点的潜力。氰基和溴原子的引入可增强其与生物大分子的相互作用，使其在抑制剂设计和结构修饰中具有较高价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于医药研发和有机合成领域。在药物发现中，它是构建抗肿瘤、抗炎及中枢神经系统药物候选分子的关键砌块。例如，可作为激酶抑制剂（如 JAK、CDK 家族）的核心结构前体。此外，在材料科学中，其刚性杂环结构可用于开发荧光探针或功能性材料。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光干燥储存，长期保存需充惰性气体保护。开封后需密封防潮，避免反复冻融。使用时应在通风橱中操作，佩戴防护手套和护目镜。溶解推荐使用无水 DMSO，配制溶液需现配现用，避免长时间暴露于空气中。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测，确保纯度 $\geq 96\%$ 。安全数据表明，其具有刺激性，可能引起皮肤、眼睛和呼吸道不适。操作时应遵守化学品通用防护规范，如不

慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地环保法规，不可直接排入下水道。

（注：本说明基于现有研究数据，具体应用需进一步实验验证。）