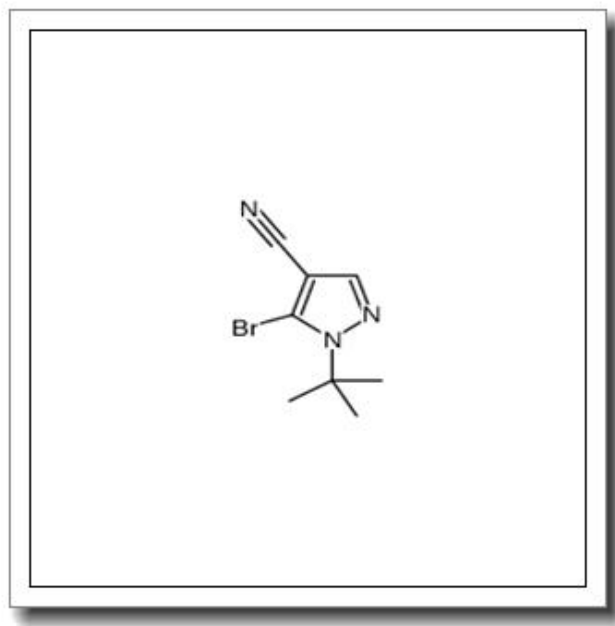


# 产品\_1658

*5-bromo-1-tert-butylpyrazole-4-carbonitrile*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	5-bromo-1-tert-butylpyrazole-4-carbonitrile
中文名称	产品_1658
CAS 号	1269292-54-7
分子式	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> BrN <sub>3</sub>
分子量	228.089
纯度	≥96%

## 产品说明

### 5-溴-1-叔丁基吡唑-4-甲腈 (产品\_1658) 产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 5-bromo-1-tert-butylpyrazole-4-carbonitrile, CAS 号 1269292-54-7, 分子式  $C_8H_{10}BrN_3$ , 分子量 228.089, 纯度  $\geq 96\%$ 。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 属于吡唑类衍生物, 具有溴代和氰基修饰的独特结构, 赋予其较高的化学反应活性。其叔丁基侧链增强了空间位阻效应, 可能影响与其他分子的相互作用模式。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为吡唑类化合物, 该产品在药物化学和材料科学中具有重要价值。其结构中的溴原子可作为后续偶联反应的活性位点, 而氰基则可能参与环化或缩合反应。此类结构常见于激酶抑制剂、抗炎药物及农药活性分子的研发中, 尤其在构建杂环骨架时表现出显著优势。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药中间体合成, 特别适用于小分子靶向药物的开发。在有机合成中, 可作为构建块用于 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等反应。此外, 在农用化学品领域, 吡唑类衍生物常用于除草剂和杀虫剂的活性成分修饰。研究级用途包括体外酶活性筛选和分子探针设计。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在  $-20^{\circ}C$ 、干燥避光条件下长期储存, 短期使用可置于  $2-8^{\circ}C$  环境。开封后需充惰性气体保护, 避免反复冻融。使用时应在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜 (DMSO), 推荐先用 DMSO 配制成母液再稀释至工作浓度。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 验证纯度  $\geq 96\%$ , 批次间差异控制在  $\pm 1\%$  以内。MS 和 NMR 谱图数据可应要求提供。安全警示: 该化合物可能对眼睛和呼吸道有刺激性, 操作时需佩戴

护目镜、防尘口罩及丁腈手套。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地危险化学品管理法规。

（注：本说明基于现有研究数据编制，实际应用前请查阅最新文献并开展小规模预实验验证。）