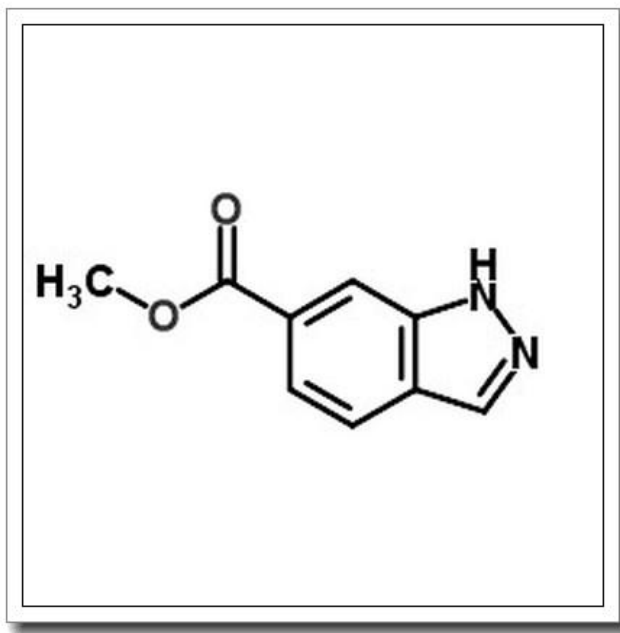


1H-吡唑-6-羧酸甲酯

Methyl 1H-indazole-6-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 1H-indazole-6-carboxylate
中文名称	1H-吡唑-6-羧酸甲酯
CAS 号	170487-40-8
分子式	C ₉ H ₈ N ₂ O ₂
分子量	176.172
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1H-吡唑-6-羧酸甲酯 (Methyl 1H-indazole-6-carboxylate, CAS 号: 170487-40-8) 是一种有机化合物, 分子式为 $C_9H_8N_2O_2$, 分子量为 176.172。该化合物属于吡唑类衍生物, 具有吡唑环结构, 并在 6 位连接有羧酸甲酯基团。其纯度通常高于 96%, 外观为白色至类白色结晶或粉末。该化合物在常温下稳定, 可溶于常见有机溶剂如甲醇、乙醇和二甲基亚砷 (DMSO), 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

1H-吡唑-6-羧酸甲酯是合成多种生物活性分子的重要中间体。吡唑类化合物在药物化学中具有广泛的应用潜力, 因其结构可作为激酶抑制剂、抗肿瘤药物和抗炎药物的核心骨架。该化合物的羧酸甲酯基团可通过水解或进一步衍生化, 为药物设计提供灵活的修饰位点。

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。具体用途包括:

- 作为合成抗肿瘤药物和激酶抑制剂的中间体。
- 用于构建含吡唑结构的化合物库, 支持高通量筛选和药物发现。
- 在材料科学中, 可作为功能化分子的前体, 用于开发新型功能材料。

4. 储存条件与使用建议

建议将 1H-吡唑-6-羧酸甲酯密封保存于干燥、阴凉的环境中, 避免光照和潮湿。储存温度应控制在 $2-8^{\circ}C$, 以延长其稳定性。使用时需在通风良好的条件下操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。建议佩戴防护手套、护目镜和实验室外套。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过高效液相色谱 (HPLC) 检测, 纯度 $\geq 96\%$ 。安全信息如下:

- 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性, 操作时应采取适当防护措施。
- 如不慎接触, 应立即用大量清水冲洗, 并寻求医疗帮助。
- 废弃处理需遵循当地法规, 避免对环境造成污染。

以上信息仅供参考，具体实验或应用需结合实际情况进行风险评估。