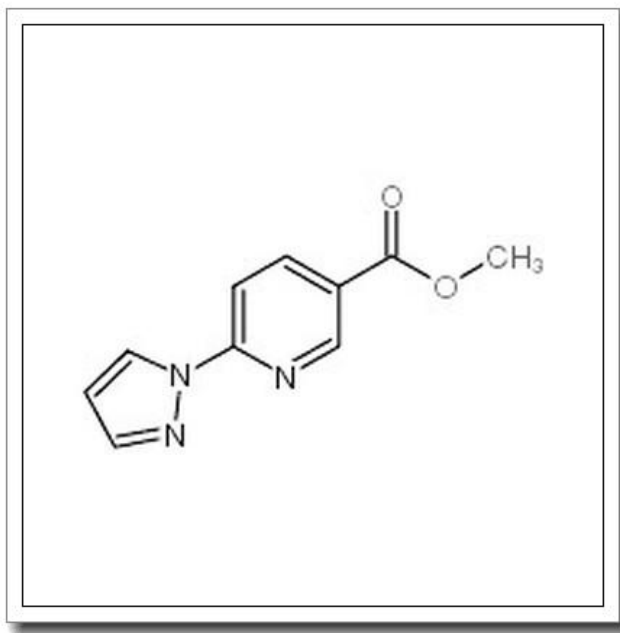


6-吡唑-1-基-烟酸甲酯

methyl 6-pyrazol-1-ylpyridine-3-carboxylate



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|---|
| 化学名称 | methyl 6-pyrazol-1-ylpyridine-3-carboxylate |
| 中文名称 | 6-吡唑-1-基-烟酸甲酯 |
| CAS 号 | 321533-62-4 |
| 分子式 | C10H9N3O2 |
| 分子量 | 203.197 |
| 纯度 | >96% |

产品说明

6-吡唑-1-基-烟酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

6-吡唑-1-基-烟酸甲酯 (methyl 6-pyrazol-1-ylpyridine-3-carboxylate) 是一种有机杂环化合物，化学式为 $C_{10}H_9N_3O_2$ ，分子量 203.197，CAS 登记号 321533-62-4。该化合物为白色至类白色结晶性粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，结构中含有吡唑基和烟酸甲酯基团，赋予其独特的化学活性和溶解性（易溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇）。其稳定性良好，需避光保存以避免光解反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡啶类衍生物，该化合物可通过杂环氮原子参与配位或氢键作用，在药物化学中常作为关键中间体。其吡唑基团能够模拟生物体内嘌呤或嘧啶结构，干扰酶活性或信号通路，因此在激酶抑制剂和抗肿瘤药物研发中具有潜在价值。此外，烟酸甲酯结构可进一步衍生为羧酸或酰胺，扩展其应用范围。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药和农药领域的合成研究：

- 医药研发：作为激酶抑制剂（如 EGFR、ALK 等）的骨架结构，用于抗肿瘤或抗炎药物开发。
- 农药化学：修饰后可作为杀虫剂或杀菌剂的活性成分前体。
- 材料科学：用于合成含氮配体，配合金属催化剂应用于偶联反应。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，置于 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 干燥环境，避免光照与湿气。开封后建议充氮保护以延长稳定性。实验操作需在通风橱中进行，佩戴防护手套和护目镜。溶解时优先选用无水 DMSO 或乙醇，避免使用强酸/强碱条件以防止酯基水解。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，MS 和 NMR 验证结构。安全数据如下：

- GHS 分类：刺激性（皮肤/眼睛接触），吞食有害。

- 应急处理: 接触皮肤后立即用肥皂水冲洗, 误食需就医。
- 运输标识: 非危险品, 但建议按一般化学品规范运输。

注: 以上信息基于现有研究数据, 具体应用需进一步实验验证。