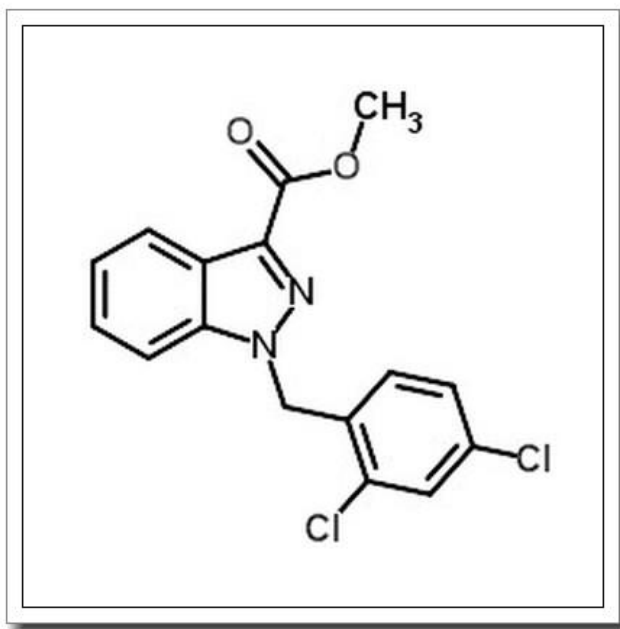


Methyl 1-(2,4-dichlorobenzyl)-1H-indazole-3-carboxylate

Methyl 1-(2,4-dichlorobenzyl)-1H-indazole-3-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 1-(2,4-dichlorobenzyl)-1H-indazole-3-carboxylate
中文名称	Methyl 1-(2,4-dichlorobenzyl)-1H-indazole-3-carboxylate
CAS 号	252025-50-6
分子式	C ₁₆ H ₁₂ Cl ₂ N ₂ O ₂
分子量	335.185
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

Methyl 1-(2,4-dichlorobenzyl)-1H-indazole-3-carboxylate (CAS 号: 252025-50-6) 是一种有机化合物, 分子式为 $C_{16}H_{12}Cl_2N_2O_2$, 分子量为 335.185。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度通常高于 96%。其结构包含一个吡唑环和一个 2,4-二氯苄基取代基, 羧酸甲酯基团位于吡唑环的 3 位。该化合物在有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO 中具有较好的溶解性, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是一种重要的吡唑类衍生物, 具有潜在的生物活性。吡唑类化合物在药物化学中广泛用作激酶抑制剂或受体调节剂的中间体。其结构中的二氯苄基和羧酸甲酯基团可能赋予其特定的电子效应和空间位阻, 从而影响其与生物靶标的相互作用。此类化合物在抗炎、抗肿瘤和神经保护等领域的研究中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

Methyl 1-(2,4-dichlorobenzyl)-1H-indazole-3-carboxylate 主要用于医药研发和有机合成领域。具体用途包括: 作为药物中间体用于合成更复杂的生物活性分子; 在激酶抑制剂研究中作为模板化合物; 在结构-活性关系 (SAR) 研究中用于优化先导化合物。此外, 它还可能用于材料科学中的功能分子设计。

4. 储存条件与使用建议

该产品应密封保存于干燥、阴凉的环境中, 推荐储存温度为 2-8°C, 避免光照和潮湿。使用前需恢复至室温并确保容器密闭。操作时应佩戴防护手套、护目镜和实验服, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。建议在通风良好的化学通风橱中称量和使用。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度 $\geq 96\%$ 。质量控制包括熔点、核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 分析以确保结构正确性。安全信息方面, 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸

道有刺激性，操作时需严格遵守实验室安全规程。如不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照当地法规处理，避免环境污染。