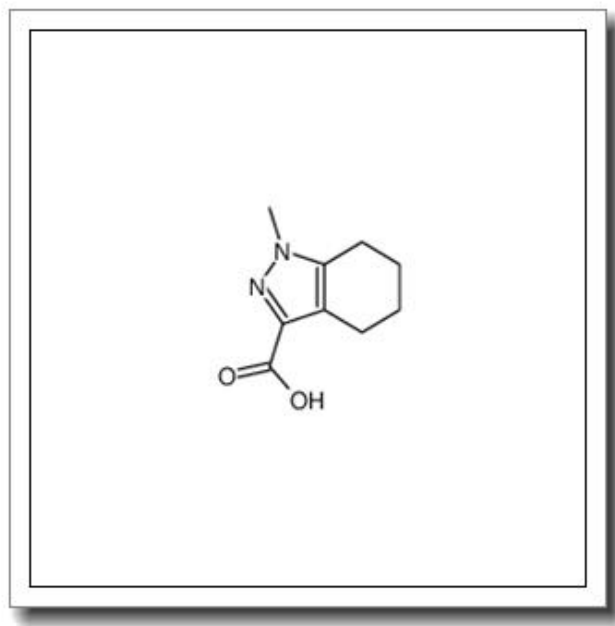


1-甲基-4,5,6,7-四氢-1H-吡唑-3-羧酸

1-methyl-4, 5, 6, 7-tetrahydroindazole-3-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-methyl-4, 5, 6, 7-tetrahydroindazole-3-carboxylic acid
中文名称	1-甲基-4, 5, 6, 7-四氢-1H-吡唑-3-羧酸
CAS 号	32286-99-0
分子式	C ₉ H ₁₂ N ₂ O ₂
分子量	180. 204
纯度	≥ 96%

产品说明

1-甲基-4, 5, 6, 7-四氢-1H-吡唑-3-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶粉末，化学名称为 1-methyl-4, 5, 6, 7-tetrahydroindazole-3-carboxylic acid, CAS 登记号 32286-99-0, 分子式 C₉H₁₂N₂O₂, 分子量 180.204。该化合物属于四氢吡唑羧酸衍生物，具有稠合双环结构（苯并吡唑环与环己烯环），羧酸基团位于 3 位碳原子上，甲基取代基位于 1 位氮原子。其纯度经 HPLC 检测 $\geq 96\%$ ，熔点为 215-218°C（分解），易溶于二甲基亚砜（DMSO）和甲醇，微溶于水（25°C 时溶解度 $< 1\text{mg/mL}$ ）。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡唑类生物活性分子的关键中间体，该化合物可通过羧基进行酯化、酰胺化等衍生化反应，其四氢化结构赋予分子良好的脂溶性和膜穿透性。在生物体内可模拟天然杂环化合物的空间构象，与多种酶活性位点产生相互作用，是设计蛋白激酶抑制剂、G 蛋白偶联受体调节剂的重要药效团。其甲基取代能增强代谢稳定性，在药物化学中具有特殊价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于以下领域：

- (1) 医药研发：作为 JAK 激酶抑制剂、5-HT 受体调节剂等小分子药物的核心骨架
- (2) 农药开发：用于合成具有杀虫、杀菌活性的杂环化合物
- (3) 生化探针：标记后可用于细胞信号通路研究
- (4) 材料科学：作为有机配体参与金属有机框架（MOF）材料的构建

4. 储存条件与使用建议

推荐储存于密闭容器中，置于 -20°C 干燥避光环境，有效期 36 个月。使用前需恢复至室温平衡 2 小时，称量应在干燥惰性气氛（如氮气手套箱）中进行。建议工作浓度 $\leq 10\text{mM}$ （DMSO 配制），避免反复冻融。对于细胞实验，需先进行溶解度测试并过滤除菌。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC (UV 254nm)、质谱和核磁共振谱 (1H NMR) 验证, 符合 ACS 试剂标准。MSDS 分类为刺激性物质 (Category 2), 操作时应佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套。若不慎接触眼睛, 需立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物处置需符合当地危险化学品管理规定。

(注: 本说明基于现有研究数据编制, 具体应用需结合实验条件优化。更多技术参数可索取 COA 证书。)