

3-醛基吲唑

1H-Indazole-3-carboxaldehyde

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	1H-Indazole-3-carboxaldehyde
中文名称	3-醛基吲唑
CAS 号	5235-10-09 00:00:00
分子式	C ₈ H ₆ N ₂ O
分子量	146.146
纯度	≥96%

产品说明

1H-Indazole-3-carboxaldehyde (3-醛基吲唑) 产品说明

1. 产品概述与化学特性

1H-Indazole-3-carboxaldehyde 是一种重要的杂环化合物，化学名称为 3-醛基吲唑，CAS 号为 5235-10-09。其分子式为 C₈H₆N₂O，分子量为 146.146，纯度通常 ≥96%。该化合物为白色至淡黄色结晶或粉末，具有典型的醛基反应活性，可溶于常见有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO，但在水中溶解度较低。其结构中的吲唑环和醛基使其成为有机合成和药物化学中的关键中间体。

2. 生物化学功能与重要性

3-醛基吲唑的醛基官能团使其易于参与缩合、加成和氧化还原反应，在构建复杂杂环体系时表现出高效性。吲唑类化合物因其与生物体内嘌呤结构的相似性，常作为激酶抑制剂或信号通路调节剂的药效团。该化合物在药物研发中用于合成抗肿瘤、抗炎和抗病毒活性分子，尤其在靶向治疗领域具有潜在应用价值。

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，例如作为 JAK 激酶抑制剂和 PARP 抑制剂的前体。在材料科学中，可用于制备荧光探针或配位聚合物。此外，在农业化学领域，其衍生物可能用于开发新型植物生长调节剂。具体实验用途包括：1) 通过醛基与胺类缩合制备希夫碱；2) 作为金属络合物的配体；3) 参与多组分反应构建吲唑并杂环体系。

4. 储存条件与使用建议

建议在 2-8℃ 避光干燥储存，长期保存需充惰性气体保护。开封后应尽快使用，避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解时建议先用 DMSO 配制母液，再稀释至工作浓度。实验后剩余溶液应按照有机废液规范处理。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测，确保纯度 ≥96%。MSDS 数据显示其具有刺激

性，操作时需佩戴防护手套和护目镜。急性毒性数据为 LD50（大鼠经口）>500 mg/kg，属于低毒类化合物，但仍需避免食入或接触黏膜。如发生泄漏，需用吸附材料收集并置于专用容器中。运输时需符合III类危险化学品规定，避免与强氧化剂混装。

注：以上信息基于现有研究数据，实际应用前请查阅最新文献并开展小试实验验证。