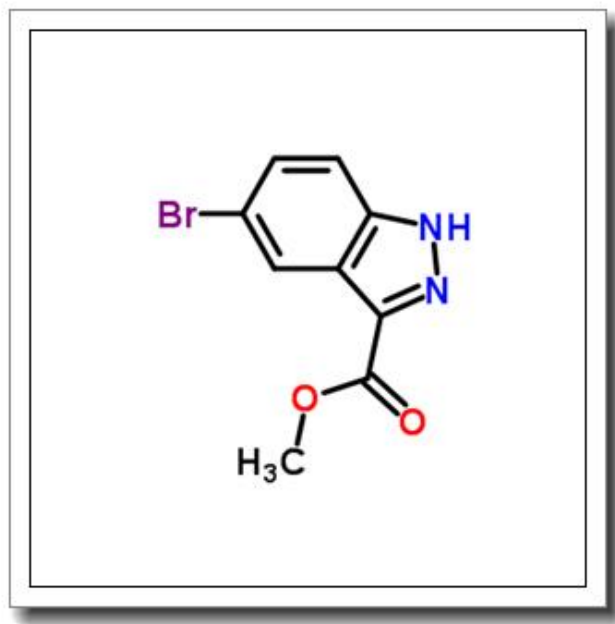


# 5-溴-1H-吲唑-3-羧酸甲酯

*Methyl 5-bromo-1H-indazole-3-carboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 5-bromo-1H-indazole-3-carboxylate
中文名称	5-溴-1H-吲唑-3-羧酸甲酯
CAS 号	78155-74-5
分子式	C <sub>9</sub> H <sub>7</sub> BrN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	255.068
纯度	≥96%

## 产品说明

### 5-溴-1H-吡唑-3-羧酸甲酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

5-溴-1H-吡唑-3-羧酸甲酯 (Methyl 5-bromo-1H-indazole-3-carboxylate) 是一种重要的吡唑类有机化合物，化学式为  $C_9H_7BrN_2O_2$ ，分子量为 255.068，CAS 号为 78155-74-5。本品为白色至类白色结晶性粉末，纯度  $\geq 96\%$ ，具有明确的溴代吡唑骨架结构，其羧酸甲酯基团赋予其良好的溶解性与反应活性，适用于多种有机合成反应。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为吡唑衍生物，在药物化学与生物活性分子研究中具有显著价值。吡唑环结构是多种激酶抑制剂和抗癌药物的核心药效团，而 5 位溴原子的引入可增强分子疏水性及与靶蛋白的结合能力。其羧酸甲酯基团可作为关键中间体，进一步水解或衍生化，用于构建更复杂的生物活性分子。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药研发与有机合成领域，具体用途包括：

- (1) 作为关键中间体用于合成抗肿瘤、抗炎及神经保护类药物；
- (2) 用于构建激酶抑制剂（如 AKT、CDK 等靶点）的分子骨架；
- (3) 在材料科学中作为功能化配体或荧光探针的前体化合物。

#### 4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，避光、防潮，建议温度 2-8°C 冷藏保存。使用时需在干燥惰性气体环境下操作（如氮气保护），避免与强氧化剂接触。溶解性测试表明，本品易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、二氯甲烷等有机溶剂，水溶性较低，建议根据实验需求选择合适的溶剂体系。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ ，MS 及 NMR 谱图验证结构准确性。操作时需佩戴防

护手套、护目镜及实验服，避免吸入粉尘或接触皮肤。安全数据表（SDS）显示其急性毒性为中等，需在通风橱中处理。废弃物应按照危险化学品规范处置。

注：本说明基于现有实验数据编写，具体应用需结合用户实验体系进一步验证。