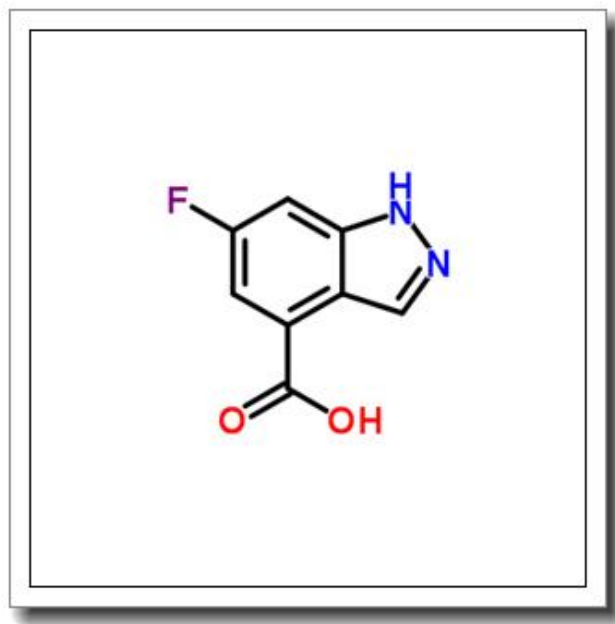


6-氟-1H-吲唑-4-羧酸

6-Fluoro-1H-indazole-4-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	6-Fluoro-1H-indazole-4-carboxylic acid
中文名称	6-氟-1H-吲唑-4-羧酸
CAS 号	848678-59-1
分子式	C ₈ H ₅ FN ₂ O ₂
分子量	180.136
纯度	≥96%

产品说明

6-氟-1H-吡唑-4-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

6-氟-1H-吡唑-4-羧酸 (6-Fluoro-1H-indazole-4-carboxylic acid) 是一种含氟吡唑类有机化合物, CAS 号为 848678-59-1, 分子式为 $C_8H_5FN_2O_2$, 分子量为 180.136。本品为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有吡唑环的刚性结构和羧酸基团的反应活性, 同时氟原子的引入增强了其生物活性和代谢稳定性。其熔点和溶解性数据需通过实验测定, 建议在干燥避光条件下保存。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为重要的医药中间体, 其吡唑骨架广泛存在于具有生物活性的分子中, 如激酶抑制剂和抗肿瘤药物。羧酸基团可进一步衍生为酰胺或酯类化合物, 用于优化药物分子的理化性质和靶向性。氟原子的引入通常能提高化合物的脂溶性和细胞膜穿透能力, 同时增强与靶蛋白的相互作用, 在药物设计中具有显著优势。

3. 主要应用领域与具体用途

6-氟-1H-吡唑-4-羧酸主要用于药物研发领域, 尤其作为构建块用于合成小分子靶向药物。其典型应用包括:

- 激酶抑制剂 (如 EGFR、ALK 抑制剂) 的关键中间体
- 抗肿瘤和抗炎候选药物的结构修饰
- 农药活性分子中的氟代杂环组分

实验室研究中, 该化合物可用于探索构效关系或作为荧光标记物的前体。

4. 储存条件与使用建议

储存条件: 建议密封保存于 $-20^{\circ}C$ 或更低温度, 长期存放需充惰性气体保护。使用前需恢复至室温并避免反复冻融。

使用建议:

- 溶解性测试推荐使用 DMSO 或碱性水溶液

- 操作时需在通风橱中进行，避免直接接触皮肤和眼睛
- 反应中建议监控 pH 值以确保羧酸基团的稳定性

5. 质量控制与安全信息

质量控制：本品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，批次间提供 COA（分析证书）。残留溶剂和重金属含量符合药典标准。

安全信息：

- 危险标识：刺激性（Xi），可能导致皮肤或眼睛刺激
- 个人防护：佩戴护目镜、防尘口罩和丁腈手套
- 应急处理：接触皮肤时立即用大量清水冲洗，误食需就医
- 废弃物处理：按危险化学品规范处置

本产品仅限科研用途，不适用于药品或食品生产。购买后请参阅随附的 MSDS（材料安全数据表）获取完整安全信息。