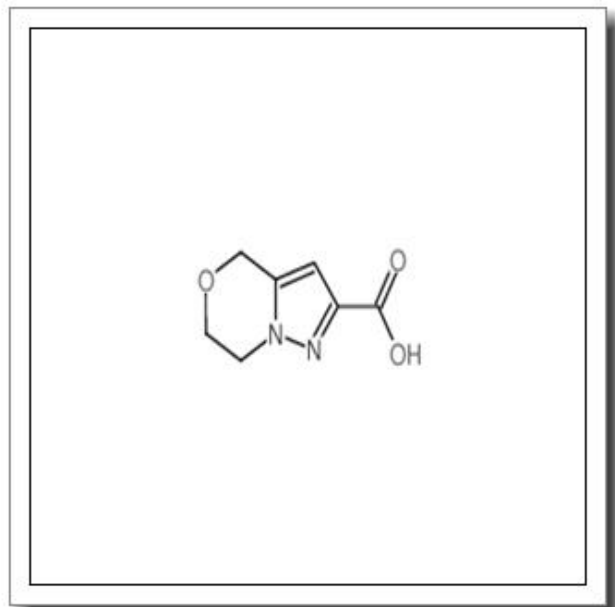


6,7-二氢-4H-吡唑并[5,1-c][1,4]噁嗪-2-羧酸

6,7-Dihydro-4H-pyrazolo[5,1-c][1,4]oxazine-2-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	6,7-Dihydro-4H-pyrazolo[5,1-c][1,4]oxazine-2-carboxylic acid
中文名称	6,7-二氢-4H-吡唑并[5,1-c][1,4]噁嗪-2-羧酸
CAS 号	1219694-53-7
分子式	C7H8N2O3
分子量	168.15
纯度	≥96%

产品说明

产品名称: 6, 7-二氢-4H-吡唑并[5, 1-c][1, 4]噁嗪-2-羧酸

英文名称: 6, 7-Dihydro-4H-pyrazolo[5, 1-c][1, 4]oxazine-2-carboxylic acid

CAS 号: 1219694-53-7

分子式: C₇H₈N₂O₃

分子量: 168.15

纯度: ≥96%

1. 产品概述与化学特性

6, 7-二氢-4H-吡唑并[5, 1-c][1, 4]噁嗪-2-羧酸是一种杂环羧酸化合物, 其结构包含吡唑环与噁嗪环的稠合体系。该化合物为白色至类白色固体, 分子量为 168.15, 具有较好的溶解性, 可溶于极性有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇, 微溶于水。其 CAS 号为 1219694-53-7, 纯度通常 ≥96%, 可通过高效液相色谱 (HPLC) 或核磁共振 (NMR) 进行表征。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为杂环羧酸衍生物, 在药物化学和生物化学研究中具有重要价值。其结构中的羧酸基团和杂环体系使其成为潜在的药物中间体, 可用于设计小分子抑制剂或配体。此外, 其独特的稠环结构可能参与氢键或 $\pi-\pi$ 相互作用, 在分子识别和酶抑制中发挥关键作用。

3. 主要应用领域与具体用途

6, 7-二氢-4H-吡唑并[5, 1-c][1, 4]噁嗪-2-羧酸主要应用于以下领域:

- 药物研发: 作为先导化合物或中间体, 用于合成抗炎、抗肿瘤或中枢神经系统药物。
- 化学合成: 用于构建复杂杂环体系, 或作为手性合成砌块。
- 生物探针开发: 通过修饰羧酸基团, 制备荧光标记物或生物活性分子。

4. 储存条件与使用建议

- 储存条件: 建议密封保存于 -20° C 或更低温度, 避免光照和潮湿环境。长期储

存需充入惰性气体（如氮气）保护。

- 使用建议：使用前恢复至室温，避免反复冻融。溶解时建议使用干燥 DMSO 或甲醇，并现配现用。操作时需佩戴防护手套和护目镜。

5. 质量控制与安全信息

- 质量控制：产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，并提供 COA（质量分析证书）。批次间稳定性通过 NMR 和质谱验证。

- 安全信息：本品可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性。若不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。操作应在通风橱中进行，避免吸入粉尘或蒸气。废弃物需按危险化学品规范处置。

本产品仅供科研用途，不适用于临床或食品领域。