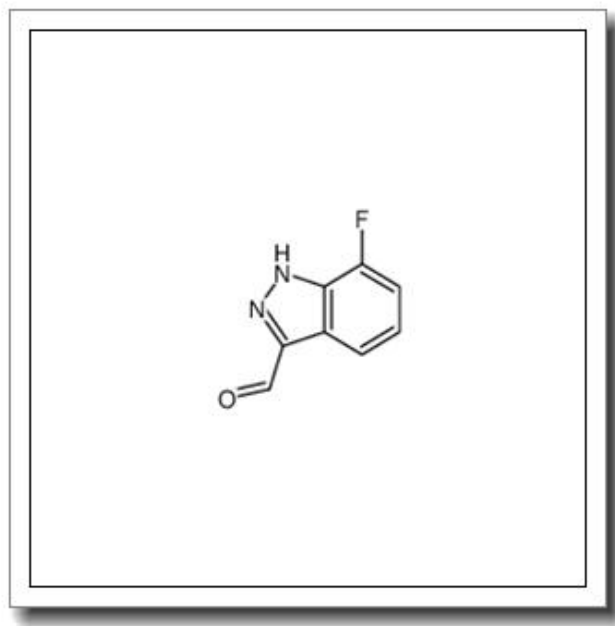


# 7-氟-1H-吲唑-3-羧醛

*7-fluoro-2H-indazole-3-carbaldehyde*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	7-fluoro-2H-indazole-3-carbaldehyde
中文名称	7-氟-1H-吲唑-3-羧醛
CAS 号	900506-29-8
分子式	C <sub>8</sub> H <sub>5</sub> FN <sub>2</sub> O
分子量	164.137
纯度	≥96%

## 产品说明

### 7-氟-1H-吡唑-3-羧醛产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

7-氟-1H-吡唑-3-羧醛 (7-fluoro-2H-indazole-3-carbaldehyde) 是一种含氟吡唑类有机化合物, CAS 号为 900506-29-8, 分子式为  $C_8H_5FN_2O$ , 分子量为 164.137。本品为白色至淡黄色结晶性粉末, 纯度  $\geq 96\%$ , 具有醛基和吡唑环的典型化学活性, 可参与缩合、加成等多种有机反应。其结构中氟原子的引入增强了化合物的脂溶性和代谢稳定性, 使其在药物化学中具有特殊价值。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为吡唑衍生物, 其分子结构中的氟原子和醛基赋予其独特的生物活性。吡唑环是多种激酶抑制剂的药效团, 而醛基可作为关键中间体用于合成杂环化合物或生物偶联。氟原子的存在能调节化合物的电子效应和亲脂性, 显著影响其与靶标蛋白的相互作用, 在药物设计中常用于优化药代动力学性质。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于医药研发和有机合成领域。在药物化学中, 它是构建抗肿瘤、抗炎及中枢神经系统药物的重要中间体, 尤其用于合成含氟吡唑类小分子抑制剂。在材料科学中, 可作为功能化配体用于金属有机框架 (MOF) 材料的制备。具体用途包括但不限于: 蛋白激酶抑制剂前体的合成、荧光探针的修饰以及新型抗癌药物的结构优化。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在  $-20^{\circ}C$  下避光保存, 长期储存需充惰性气体保护。开封后需密封防潮, 避免反复冻融。使用时应在干燥惰性气氛 (如氮气) 下操作, 因其醛基对空气敏感, 易氧化成羧酸。溶解推荐使用无水 DMF 或 DMSO, 避免使用含活泼氢的溶剂。实验操作需佩戴防护手套和护目镜。

#### 5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ , 残留溶剂符合 ICH 标准。MS 和 NMR 谱图确保结构准

确性。安全数据：急性毒性（LD50）未明确，但需避免吸入或皮肤接触。可能引起眼睛和呼吸道刺激，操作应在通风橱中进行。废弃物需按危险化学品处理规范处置。如需更多技术资料或 COA 报告，请联系供应商获取。