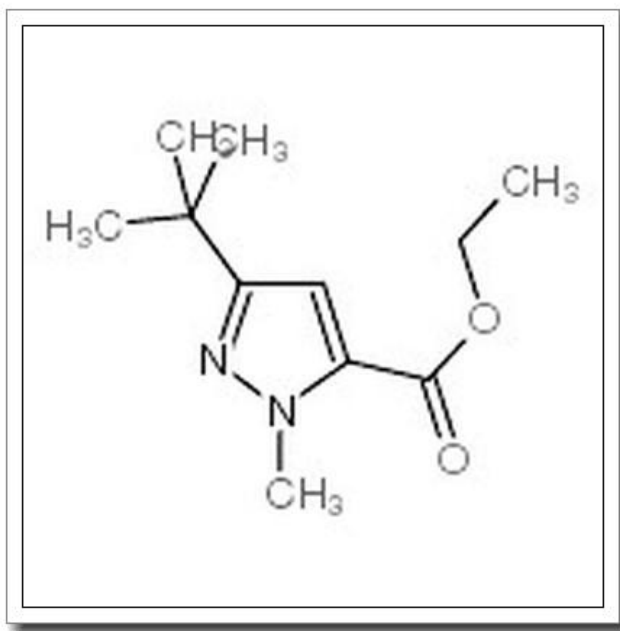


3-(叔丁基)-1-甲基-1H-吡唑-5-羧酸乙酯

ethyl 5-tert-butyl-2-methylpyrazole-3-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 5-tert-butyl-2-methylpyrazole-3-carboxylate
中文名称	3-(叔丁基)-1-甲基-1H-吡唑-5-羧酸乙酯
CAS 号	133261-10-6
分子式	C ₁₁ H ₁₈ N ₂ O ₂
分子量	210.273
纯度	>96%

产品说明

3-(叔丁基)-1-甲基-1H-吡唑-5-羧酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 ethyl 5-tert-butyl-2-methylpyrazole-3-carboxylate, CAS 号 133261-10-6, 分子式 C₁₁H₁₈N₂O₂, 分子量 210.273, 是一种高纯度 (>96%) 的吡唑类衍生物。其结构特征为吡唑环 5 位连接叔丁基、3 位酯化羧基, 具有疏水性叔丁基与极性酯基的协同作用, 赋予化合物独特的溶解性 (易溶于有机溶剂如乙醇、丙酮) 和稳定性。常温下为白色至类白色结晶或粉末, 需避光保存。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡唑羧酸酯类化合物, 该分子可通过酯键水解生成活性羧酸中间体, 或作为杂环骨架参与亲核取代反应。其叔丁基空间位阻可调节反应选择性, 在药物化学中常用于构建靶向酶抑制剂的药效团, 尤其在抗炎、抗肿瘤先导化合物设计中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于以下领域:

医药研发——作为激酶抑制剂 (如 p38 MAPK、JAK 家族) 的关键中间体, 用于合成小分子抗炎药物;

农药化学——修饰后可作为杀虫剂或杀菌剂的活性组分;

材料科学——用于制备含氮杂环功能化高分子材料。实验室级产品适用于克级至公斤级有机合成。

4. 储存条件与使用建议

储存于 2-8℃ 惰性气体 (如氩气) 保护的密闭容器中, 避免与强氧化剂、酸碱共存。开封后建议分装使用, 剩余物料需充氮密封。操作时佩戴防尘口罩、化学护目镜及丁腈手套, 通风橱内进行称量。溶解性测试推荐优先选用二甲亚砜 (DMSO) 配制母液。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，水分含量 $\leq 0.5\%$ （Karl Fischer 法），残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据（SDS）显示该品对眼睛和皮肤有轻微刺激性（GHS 分类：Warning），误接触需立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物处置应遵守当地危险化学品管理条例。

注：本产品仅限科研用途，不适用于食品、药品或化妆品直接生产。具体应用需结合实验方案进一步验证。