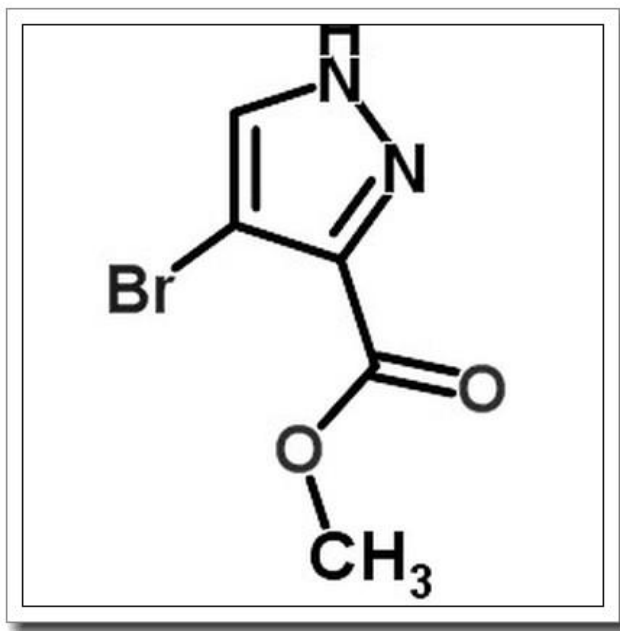


## 4-溴-吡唑-3-甲酸乙酯

*methyl 4-bromo-1H-pyrazole-5-carboxylate*



### 产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 4-bromo-1H-pyrazole-5-carboxylate
中文名称	4-溴-吡唑-3-甲酸乙酯
CAS 号	81190-89-8
分子式	C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> BrN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	205.009
纯度	>96%

## 产品说明

### 4-溴吡唑-3-甲酸乙酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 methyl 4-bromo-1H-pyrazole-5-carboxylate (4-溴-吡唑-3-甲酸乙酯), CAS 号为 81190-89-8, 分子式为  $C_5H_5BrN_2O_2$ , 分子量为 205.009。该化合物为白色至类白色结晶粉末, 纯度 >96%, 属于吡唑类衍生物, 具有溴代和酯基双重活性位点, 易溶于有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇, 微溶于水。其结构特征使其成为有机合成中重要的中间体。

#### 2. 生物化学功能与重要性

4-溴吡唑-3-甲酸乙酯的吡唑环结构在药物化学中具有核心地位, 可作为构建杂环化合物的关键骨架。溴原子的引入增强了分子的反应活性, 便于后续的偶联或取代反应, 而酯基则提供了进一步水解或修饰的灵活性。此类化合物在抑制酶活性或调控信号通路方面表现出潜在价值, 尤其在抗炎、抗肿瘤药物研发中备受关注。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药、农药及材料科学领域。在医药研发中, 常用于合成靶向激酶抑制剂或抗病毒药物前体; 在农药领域, 可作为杀菌剂或杀虫剂的中间体; 此外, 还可用于功能材料如荧光探针的制备。具体实验用途包括 Suzuki 偶联、亲核取代反应等。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于  $-20^{\circ}C$  至  $4^{\circ}C$  的干燥环境中, 避免光照与潮湿。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时应在通风橱中操作, 佩戴防护手套及护目镜。溶解推荐使用无水 DMF 或乙醇, 现配现用以避免水解。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 >96%, 批次间一致性严格把控。安全数据表明, 其具有刺激性, 可能引起皮肤或眼部不适。若不慎接触, 需立即用大量清水冲洗并就医。废

弃物应作为有害化学废料处理，遵守当地环保法规。运输时需贴腐蚀性标签，避免与强氧化剂共存。

（注：以上信息基于实验室环境数据，实际应用需结合具体实验方案调整。）