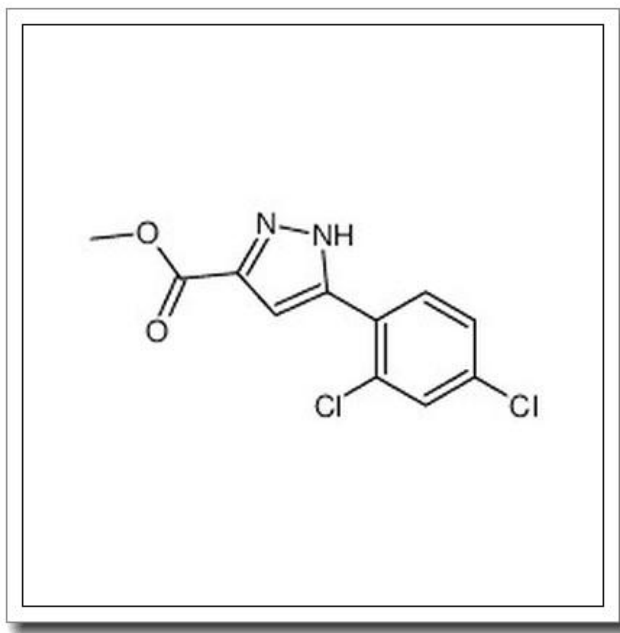


5-(2,4-二氯苯基)吡唑-3-羧酸乙酯

Methyl 3-(2,4-dichlorophenyl)-1H-pyrazole-5-carboxylate



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|---|
| 化学名称 | Methyl 3-(2,4-dichlorophenyl)-1H-pyrazole-5-carboxylate |
| 中文名称 | 5-(2,4-二氯苯基)吡唑-3-羧酸乙酯 |
| CAS 号 | 944783-94-2 |
| 分子式 | C11H8Cl2N2O2 |
| 分子量 | 271.099 |
| 纯度 | >96% |

产品说明

5-(2,4-二氯苯基)吡唑-3-羧酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 Methyl 3-(2,4-dichlorophenyl)-1H-pyrazole-5-carboxylate, CAS 号为 944783-94-2, 分子式为 C₁₁H₈Cl₂N₂O₂, 分子量 271.099。外观为白色至类白色结晶粉末, 纯度经 HPLC 验证 ≥96%。该化合物属于吡唑羧酸酯衍生物, 结构中含二氯苯基活性基团, 具有稳定的芳香环系统和极性酯键, 易溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡唑类化合物的关键中间体, 其结构中的二氯苯基赋予分子亲脂性, 而羧酸酯基团可通过水解修饰为活性羧酸。该特性使其在药物化学中广泛应用于先导化合物优化, 尤其在抗炎、抗菌及抗肿瘤靶点分子设计中具有重要价值。其吡唑环可作为氢键受体或供体参与靶蛋白相互作用。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发和有机合成领域。在药物开发中, 常用于构建激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂的母核结构。具体用途包括: 作为 EGFR 抑制剂类抗癌药物的合成前体; 用于农用化学品中杀菌剂的结构修饰; 在荧光探针开发中作为信号标记模块。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20℃ 干燥环境中, 避免光照及潮湿。开封后需充氮保护以延长稳定性。使用时应佩戴防护手套、护目镜, 在通风橱中操作。溶解推荐使用无水 DMSO (浓度 ≤10mM), 避免反复冻融。工作液建议现配现用, 剩余溶液需在 -80℃ 短期保存 (≤7 天)。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 GC-MS 和 NMR 双重验证, 杂质含量符合药用标准。MSDS 显示其急性毒性类别为 4 级 (LD₅₀ > 300mg/kg), 但长期接触可能造成皮肤敏化。废弃处理需遵循

危险化学品规范，采用焚烧法并配备碱液吸收装置。实验操作后需用大量清水冲洗接触部位，如遇意外吸入应立即就医。

注：以上数据基于实验室环境测试，实际应用需根据具体实验条件优化。更多技术参数可索取 COA 报告。