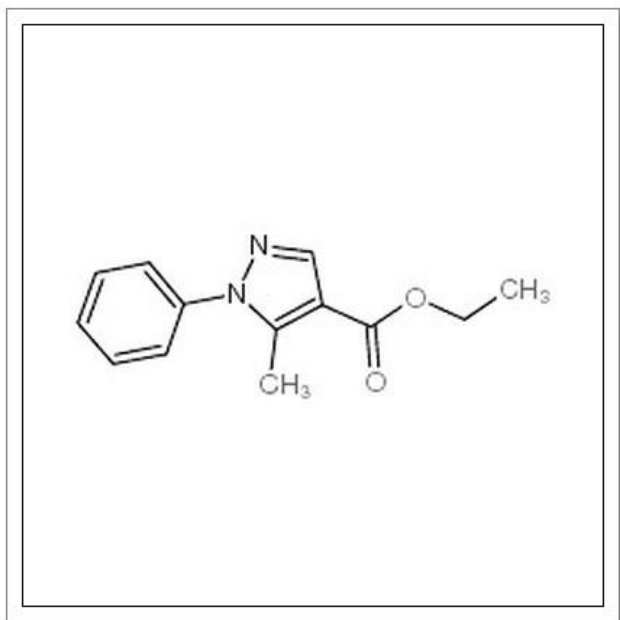


5-甲基-1-苯基-1H-吡唑-4-甲酸乙酯

ethyl 5-methyl-1-phenylpyrazole-4-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 5-methyl-1-phenylpyrazole-4-carboxylate
中文名称	5-甲基-1-苯基-1H-吡唑-4-甲酸乙酯
CAS 号	89193-16-8
分子式	C ₁₃ H ₁₄ N ₂ O ₂
分子量	230.262
纯度	>96%

产品说明

5-甲基-1-苯基-1H-吡唑-4-甲酸乙酯 (Ethyl 5-methyl-1-phenylpyrazole-4-carboxylate) 是一种有机化合物, CAS 号为 89193-16-8, 分子式为 C₁₃H₁₄N₂O₂, 分子量为 230.262。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 纯度高于 96%, 具有良好的化学稳定性和溶解性, 可溶于多种有机溶剂如乙醇、甲醇和二甲基亚砜 (DMSO), 微溶于水。其结构中的吡唑环和苯基基团使其在有机合成中具有较高的反应活性。

1. 生物化学功能与重要性

该化合物是吡唑类衍生物的重要中间体, 吡唑环结构广泛存在于药物和生物活性分子中。其独特的化学结构使其在药物研发中具有潜在的应用价值, 特别是在抗炎、抗菌和抗肿瘤活性化合物的合成中。此外, 它还可作为配体或前体用于金属有机框架 (MOF) 材料的制备, 在催化领域具有一定潜力。

2. 主要应用领域与具体用途

5-甲基-1-苯基-1H-吡唑-4-甲酸乙酯主要用于医药和农药中间体的合成。在医药领域, 它是合成非甾体抗炎药 (NSAIDs) 和抗癫痫药物的关键原料。在农药领域, 可用于制备具有杀虫或杀菌活性的吡唑类化合物。此外, 在材料科学中, 该化合物可作为功能材料的构建单元, 用于开发新型高分子材料或荧光探针。

3. 储存条件与使用建议

建议将本品密封保存于阴凉、干燥、通风良好的环境中, 避免阳光直射和潮湿。储存温度应控制在 2-8° C 以延长稳定性。使用时需佩戴防护手套、护目镜和实验服, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。操作应在通风橱中进行, 远离火源和氧化剂。

4. 质量控制与安全信息

本产品通过高效液相色谱 (HPLC) 检测, 纯度 ≥96%。可能含有微量杂质, 建议使用前进行进一步纯化以满足特定实验需求。该化合物对眼睛、皮肤和呼吸道有轻微刺激性, 若不慎接触, 应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照当地法规处理, 避免对环境造成污染。

以上信息仅供参考，具体应用需结合实验需求和安全评估进行。