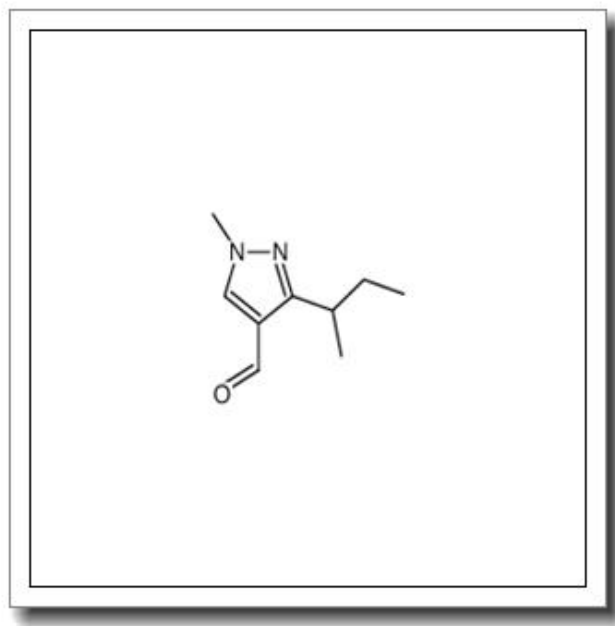


1-甲基-3-(1-甲基丙基)-1H-吡唑-4-羧醛

3-butan-2-yl-1-methylpyrazole-4-carbaldehyde



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-butan-2-yl-1-methylpyrazole-4-carbaldehyde
中文名称	1-甲基-3-(1-甲基丙基)-1H-吡唑-4-羧醛
CAS 号	1172893-08-1
分子式	C ₉ H ₁₄ N ₂ O
分子量	166.22
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-甲基-3-(1-甲基丙基)-1H-吡唑-4-羧醛 (CAS 号: 1172893-08-1) 是一种吡唑类衍生物, 分子式为 $C_9H_{14}N_2O$, 分子量为 166.22。该化合物为无色至淡黄色液体或低熔点固体, 具有典型的醛基反应活性, 可与胺类、醇类等发生缩合反应。其纯度 $\geq 96\%$, 结构中的吡唑环和醛基使其在有机合成中具有较高的反应多样性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为吡唑醛类中间体, 在药物化学和农药合成中具有重要价值。吡唑环是许多生物活性分子的核心结构, 例如非甾体抗炎药和杀虫剂。醛基的引入进一步扩展了其修饰潜力, 可用于构建杂环化合物或作为手性合成的关键砌块。

3. 主要应用领域与具体用途

- 医药研发: 用于合成具有抗炎、抗菌或抗肿瘤活性的吡唑类先导化合物。
- 农药开发: 作为新型杀虫剂或除草剂的中间体, 尤其适用于拟除虫菊酯类衍生物的修饰。
- 材料科学: 参与制备功能性高分子材料或配位聚合物。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 $2-8^{\circ}C$ 的干燥环境中, 避免光照和潮湿。开封后需充惰性气体保护以延缓氧化。使用时应在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入蒸气。溶解性测试表明其易溶于甲醇、乙醇等有机溶剂, 水溶性较低。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确保纯度 $\geq 96\%$, 同时提供核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 数据以验证结构。安全数据表明其具有刺激性, 操作时需佩戴防护手套和护目镜。若接触皮肤, 应立即用大量清水冲洗。废弃物应按照国家危险化学品规范处置。

(注: 实际使用前请查阅最新版安全技术说明书 (MSDS) 并遵守当地法规。)