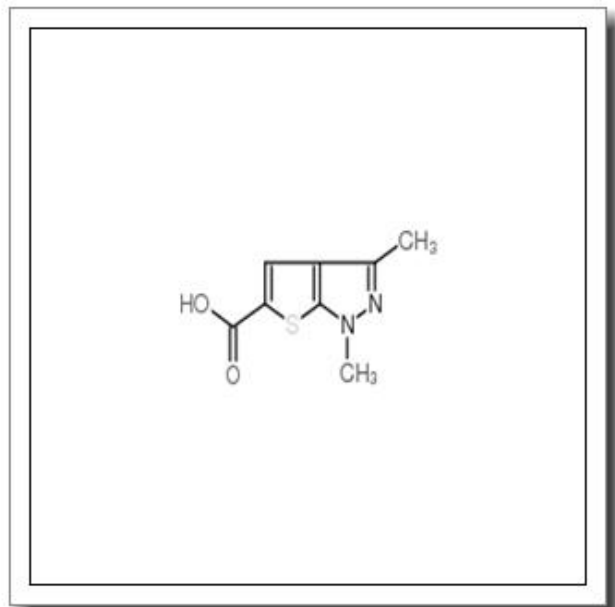


1,3-二甲基-1H-噻吩并[2,3-c]吡唑-5-羧酸

1,3-dimethylthieno[2,3-c]pyrazole-5-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	1,3-dimethylthieno[2,3-c]pyrazole-5-carboxylic acid
中文名称	1,3-二甲基-1H-噻吩并[2,3-c]吡唑-5-羧酸
CAS 号	25252-46-4
分子式	C ₈ H ₈ N ₂ O ₂ S
分子量	196.226
纯度	≥ 96%

产品说明

1, 3-二甲基-1H-噻吩并[2, 3-c]吡唑-5-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

1, 3-二甲基-1H-噻吩并[2, 3-c]吡唑-5-羧酸 (CAS 号: 25252-46-4) 是一种具有噻吩并吡唑骨架的杂环羧酸衍生物, 分子式为 $C_8H_8N_2O_2S$, 分子量 196.226。该化合物以白色至类白色结晶性粉末形式存在, 纯度 $\geq 96\%$, 兼具芳香杂环的稳定性和羧酸基团的反应活性。其结构中噻吩环与吡唑环的稠合体系赋予其独特的电子分布特性, 可作为有机合成中间体或配体用于金属配合物构建。

2. 生物化学功能与重要性

作为噻吩并吡唑类化合物的代表性衍生物, 该分子可通过羧基进行酯化、酰胺化等修饰, 进一步拓展其生物活性。其杂环结构可模拟生物体内嘌呤或嘧啶碱基的相互作用模式, 在药物化学中常用于激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂的设计。此外, 硫原子的存在增强了分子与金属离子的配位能力, 在催化或材料科学领域具有潜在价值。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本品是构建抗炎、抗肿瘤先导化合物的关键中间体, 尤其适用于 JAK/STAT 信号通路抑制剂的结构优化。在材料科学中, 可用作有机光电材料的合成前体, 或作为配体参与制备发光金属有机框架 (MOF)。工业上还可用于功能性染料和农药活性分子的结构修饰。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20°C 至 4°C 的干燥环境中, 避免光照及潮湿。开封后需充入惰性气体保护。使用时应在通风橱中操作, 溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、微溶于甲醇, 水溶性较差 ($< 0.1 \text{ mg/mL}$), 建议先用极性有机溶剂预溶后再进行后续稀释。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。MSDS 数据显示其具

有刺激性，操作时需佩戴防护手套和护目镜，避免吸入粉尘或接触皮肤。废弃物应作为有害化学品处理，不可直接排入下水道。急性毒性数据（LD50 大鼠口服）>500 mg/kg，属于低毒类物质，但仍需遵循实验室安全规范。

（注：实际应用前请查阅最新版物质安全数据表，具体合成条件需根据目标产物结构进行优化。）