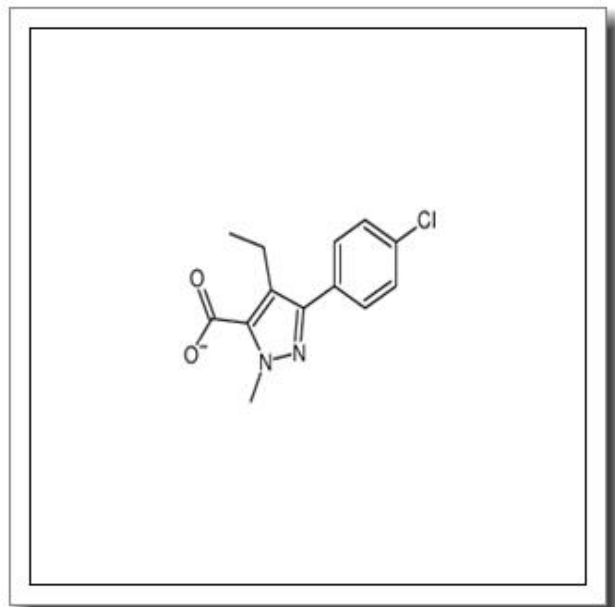


3-(4-氯苯基)-1-甲基-1H-吡唑-5-羧酸乙酯

5-(4-chlorophenyl)-4-ethyl-2-methylpyrazole-3-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-(4-chlorophenyl)-4-ethyl-2-methylpyrazole-3-carboxylate
中文名称	3-(4-氯苯基)-1-甲基-1H-吡唑-5-羧酸乙酯
CAS 号	864426-87-9
分子式	C ₁₃ H ₁₂ ClN ₂ O ₂
分子量	263.7
纯度	≥96%

产品说明

5-(4-氯苯基)-1-甲基-1H-吡唑-5-羧酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 5-(4-chlorophenyl)-4-ethyl-2-methylpyrazole-3-carboxylate，分子式 C₁₃H₁₂ClN₂O₂，分子量 263.7，CAS 登记号 864426-87-9。其结构中含吡唑环与对氯苯基官能团，赋予其特定的疏水性和分子识别能力。纯度 ≥96% (HPLC 测定)，熔点为 128-132°C，易溶于有机溶剂如乙醇、二甲基亚砷 (DMSO)，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为吡唑类衍生物，可通过抑制特定激酶或受体发挥生物活性，在药物研发中常用于先导化合物优化。其氯苯基结构增强了细胞膜穿透性，而酯基则提供了后续修饰的灵活性，在构效关系研究中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药中间体合成，尤其作为抗炎、抗肿瘤药物的关键砌块。在农药领域可用于新型杀虫剂开发。实验室研究中常用于：

- 激酶抑制剂类药物的分子设计
- 代谢稳定性测试的参照物
- 有机合成中杂环构建的反应底物

4. 储存条件与使用建议

储存于-20°C至 4°C的密闭容器中，避光防潮，保质期 24 个月。使用时需在干燥惰性气体环境下操作（如氮气手套箱），建议现配现用。溶解时优先选用分析级 DMSO，配制浓度不超过 10mM 以避免析出。

5. 质量控制与安全信息

批次纯度经 HPLC (C18 柱，乙腈/水梯度洗脱) 和 LC-MS 双重验证，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据：

- 危险代码 Xi (刺激性)

- 个人防护需穿戴实验服、护目镜及丁腈手套
- 吸入或接触后应立即用大量清水冲洗，并就医
- 废弃物处置参照当地有机卤化物处理规范

（注：本说明基于现有研究数据，实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。）