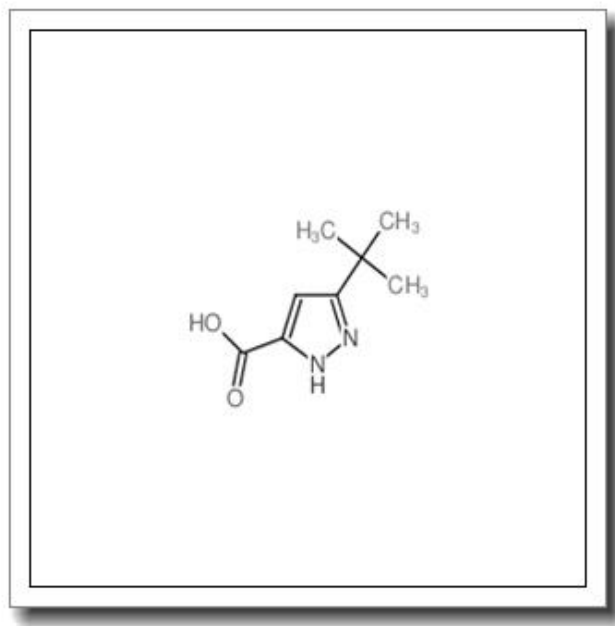


3-叔丁基-1H-吡唑-5-甲酸

5-tert-butyl-1H-pyrazole-3-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-tert-butyl-1H-pyrazole-3-carboxylic acid
中文名称	3-叔丁基-1H-吡唑-5-甲酸
CAS 号	83405-71-4
分子式	C ₈ H ₁₂ N ₂ O ₂
分子量	168.193
纯度	≥96%

产品说明

5-叔丁基-1H-吡唑-3-甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-叔丁基-1H-吡唑-3-甲酸（化学名称：5-tert-butyl-1H-pyrazole-3-carboxylic acid）是一种含叔丁基取代基的吡唑羧酸衍生物，CAS 号为 83405-71-4，分子式为 C₈H₁₂N₂O₂，分子量为 168.193。本品为白色至类白色结晶性粉末，纯度 ≥96%，具有吡唑环的典型化学性质，可在酸性或碱性条件下发生酯化、酰胺化等反应。其结构中羧基与吡唑环的协同作用使其成为有机合成中的重要中间体。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物通过吡唑环的氮原子和羧基的氧原子参与配位或氢键形成，在药物化学中常用于构建杂环骨架。其叔丁基的立体位阻效应可调节分子亲脂性，影响生物膜穿透能力。作为小分子抑制剂或配体的关键结构单元，在酶活性调控和受体结合研究中具有广泛潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药研发：用于合成抗炎、抗肿瘤等靶向药物的先导化合物，尤其适用于激酶抑制剂开发。
- 3.2 材料科学：作为金属有机框架（MOFs）的有机连接体前体。
- 3.3 农药化学：参与新型杀虫剂和除草剂的分子设计。
- 3.4 学术研究：作为标准品用于分析检测方法开发或反应机理研究。

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存：密封保存于干燥、避光环境中，建议温度 2-8℃，长期存放需充惰性气体保护。
- 4.2 溶解性：易溶于二甲基亚砜（DMSO）、甲醇等极性有机溶剂，水溶性较差，建议超声辅助溶解。
- 4.3 操作：需在通风橱中使用，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

- 5.1 质量控制：通过 HPLC 测定纯度，核磁共振（NMR）和质谱（MS）验证结构。
- 5.2 安全数据：根据 GHS 分类，可能引起皮肤刺激（H315）和眼睛刺激（H319），操作时应佩戴防护手套和护目镜。
- 5.3 废弃物处理：按危险化学品规范处置，不可直接排入下水道。

本产品仅供科研用途，不适用于医药、食品或家庭用途。具体应用前请查阅最新文献资料并开展安全性评估。