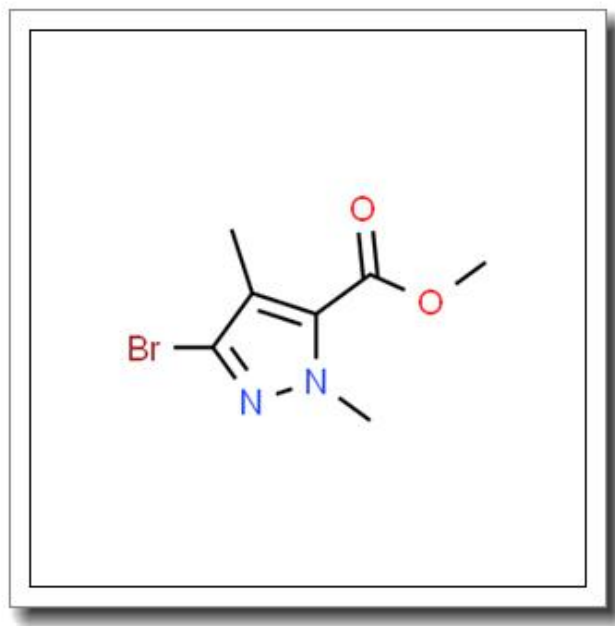


3-溴-1,4-二甲基-1H-吡唑-5-羧酸甲酯

Methyl 3-bromo-1,4-dimethyl-1H-pyrazole-5-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 3-bromo-1,4-dimethyl-1H-pyrazole-5-carboxylate
中文名称	3-溴-1,4-二甲基-1H-吡唑-5-羧酸甲酯
CAS 号	1780677-51-1
分子式	C ₇ H ₉ BrN ₂ O ₂
分子量	233.06256
纯度	≥96%

产品说明

3-溴-1,4-二甲基-1H-吡唑-5-羧酸甲酯 (Methyl 3-bromo-1,4-dimethyl-1H-pyrazole-5-carboxylate) 产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶或粉末，化学式为 C₇H₉BrN₂O₂，分子量 233.06256，CAS 号 1780677-51-1。其结构包含吡唑环核心，在 3 位被溴原子取代，1 位和 4 位分别连接甲基，5 位为羧酸甲酯基团。该化合物具有较高的化学稳定性，纯度标准 ≥96% (HPLC 测定)，易溶于有机溶剂如二氯甲烷、乙醇，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为溴代吡唑衍生物，该化合物是合成复杂杂环化合物的重要中间体。其结构中的溴原子和酯基具有高反应活性，可通过偶联、水解等反应进一步修饰，在药物化学中用于构建活性分子骨架。此外，吡唑类化合物普遍具有生物活性，可能参与酶抑制或受体调节。

3. 主要应用领域与具体用途

- 医药研发：用于合成抗炎、抗肿瘤等小分子候选药物，尤其作为激酶抑制剂的构建模块。
- 农药化学：作为杀菌剂或杀虫剂的前体，例如修饰为含吡唑结构的农用化学品。
- 材料科学：参与制备功能化有机材料或配体，用于金属催化体系。

4. 储存条件与使用建议

- 储存于密封容器中，避光、防潮，建议温度 2-8°C (长期保存) 或室温 (短期使用)。
- 操作时需在通风橱中进行，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。建议佩戴防护手套、护目镜及实验服。
- 开封后建议充氮保护以延长稳定性，避免反复冻融。

5. 质量控制与安全信息

- 质量控制：通过 HPLC、NMR 和质谱确保纯度和结构一致性，批次提供 COA (质量

分析证书)。

- 安全提示：本品对眼睛和皮肤有刺激性，可能引起过敏反应。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。
- 废弃物处理：按危险化学品规范处置，避免与强氧化剂混放。

(注：具体实验方案需结合文献优化，本说明仅提供基础参考。)