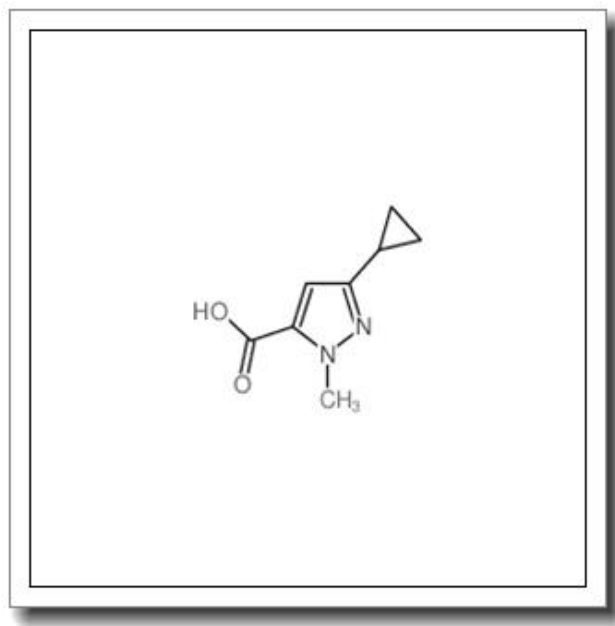


3-环丙基-1-甲基-1H-吡唑-5-羧酸

5-cyclopropyl-2-methylpyrazole-3-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-cyclopropyl-2-methylpyrazole-3-carboxylic acid
中文名称	3-环丙基-1-甲基-1H-吡唑-5-羧酸
CAS 号	957500-07-1
分子式	C ₈ H ₁₀ N ₂ O ₂
分子量	166.177
纯度	≥96%

产品说明

5-环丙基-2-甲基吡唑-3-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 5-cyclopropyl-2-methylpyrazole-3-carboxylic acid (CAS 957500-07-1)，是一种含环丙基取代的吡唑羧酸衍生物。分子式为 C₈H₁₀N₂O₂，分子量 166.177，外观通常为白色至类白色结晶性粉末。其结构中吡唑环的 3 位羧酸基团和 5 位环丙基赋予分子独特的空间位阻和极性，使其在有机合成中表现出高反应选择性。纯度标准 ≥96% (HPLC)，需避光保存以避免可能的降解。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡唑类化合物的关键中间体，该分子可通过羧基活化参与酰胺化、酯化等反应，同时环丙基的刚性结构可增强与生物靶点的结合能力。在药物化学中，吡唑骨架广泛存在于激酶抑制剂、抗炎及抗肿瘤活性分子中，例如作为 JAK/STAT 信号通路调节剂的合成前体。其结构特性对优化药物分子的代谢稳定性和生物利用度具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药研发和精细化工领域。在药物开发中，可作为构建杂环化合物的核心模块，用于合成抗病毒、抗糖尿病等小分子候选药物。在材料科学中，其衍生物可用于制备功能性高分子或液晶材料。具体实验用途包括但不限于：有机金属催化剂配体、蛋白质-配体相互作用研究中的探针分子，以及高通量筛选库的构建组分。

4. 储存条件与使用建议

储存于密封容器中，置于干燥、避光且通风良好的环境中，推荐温度 2-8℃。长期保存建议充氮保护。使用时需在惰气（如氩气）保护下操作，避免与强氧化剂接触。溶解性测试表明，本品易溶于 DMSO、甲醇，微溶于水，配制溶液时需根据实验需求选择适当溶剂并超声助溶。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 和质谱分析验证，符合严格的质量控制标准。安全数据表明，其急性毒性（LD50）为 >500 mg/kg（大鼠经口），但仍需遵守实验室安全规范：操作时佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩，避免吸入或皮肤直接接触。如发生意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地化学品管理法规。

（注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件进一步验证。）