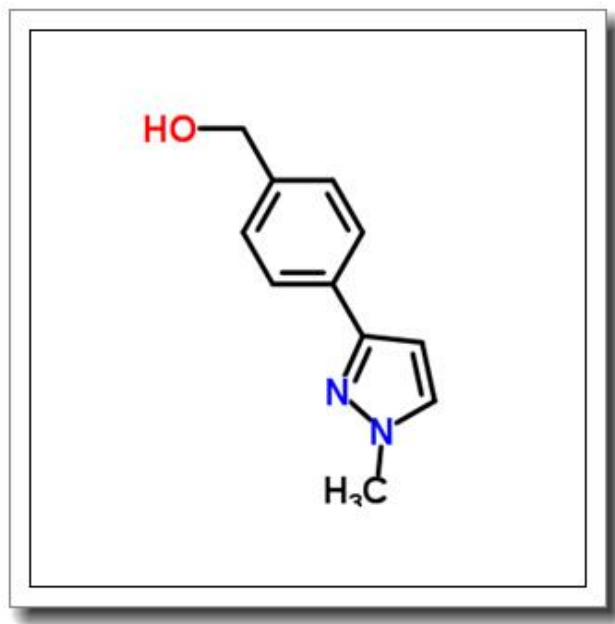


4-(1-甲基-1H-吡唑-3-基)苯甲醇

[4-(1-methylpyrazol-3-yl)phenyl]methanol



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|--|
| 化学名称 | [4-(1-methylpyrazol-3-yl)phenyl]methanol |
| 中文名称 | 4-(1-甲基-1H-吡唑-3-基)苯甲醇 |
| CAS 号 | 179055-20-0 |
| 分子式 | C ₁₁ H ₁₂ N ₂ O |
| 分子量 | 188.226 |
| 纯度 | ≥96% |

产品说明

4-(1-甲基-1H-吡唑-3-基)苯甲醇产品说明书

产品概述与化学特性

4-(1-甲基-1H-吡唑-3-基)苯甲醇 ([4-(1-methylpyrazol-3-yl)phenyl]methanol) 是一种有机化合物, CAS 号为 179055-20-0, 分子式为 C₁₁H₁₂N₂O, 分子量为 188.226。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 纯度 ≥96%, 兼具苯甲醇和吡唑环的结构特征, 具有良好的溶解性和反应活性, 可溶于常见有机溶剂如甲醇、乙醇和二甲基亚砜 (DMSO)。

生物化学功能与重要性

该化合物是一种重要的医药中间体和生物活性分子砌块。其结构中的吡唑环和苯甲醇基团使其在药物设计中具有广泛的应用潜力, 尤其是在激酶抑制剂和抗炎药物的开发中。吡唑环可作为氢键受体和供体, 与生物靶标形成特异性相互作用, 而苯甲醇基团则提供了进一步结构修饰的位点。

主要应用领域与具体用途

1. 医药研发: 作为关键中间体用于合成抗肿瘤、抗炎和抗感染药物, 特别是针对 JAK 激酶家族和 MAP 激酶通路的抑制剂。
2. 农药化学: 用于开发新型杀虫剂和杀菌剂, 其结构可有效干扰害虫的神经系统或病原体的代谢过程。
3. 材料科学: 作为功能单体参与高分子材料的合成, 赋予材料特殊的光电性能或生物相容性。
4. 学术研究: 在化学生物学研究中用作探针分子或工具化合物, 探索蛋白质-小分子相互作用机制。

储存条件与使用建议

1. 储存条件: 应密封保存于 2-8°C 的干燥环境中, 避免光照和潮湿。长期储存建议充入惰性气体保护。
2. 使用建议: 使用前需恢复至室温并充分干燥。建议在通风橱中操作, 避免直接

接触皮肤和眼睛。溶解时可轻微加热 ($\leq 60^{\circ}\text{C}$) 以加速溶解过程。

3. 稳定性: 在干燥惰性气氛下稳定, 但对强氧化剂和强酸敏感, 需避免与之接触。

质量控制与安全信息

1. 质量控制: 通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 同时进行核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 验证结构。

2. 安全信息: 根据 GHS 分类, 该产品可能引起眼睛刺激 (类别 2B) 和皮肤刺激 (类别 2)。操作时应佩戴防护眼镜、手套和实验服。

3. 应急处理: 如接触皮肤, 立即用大量清水冲洗; 如不慎吸入, 应转移至空气新鲜处。废弃物应按照危险化学品处理规范处置。

4. 运输规范: 属于普通化学品, 但建议按危险品标准包装运输, 避免剧烈震动和高温环境。

本产品仅供科研和工业用途, 不适用于医药、食品或家庭用途。使用者应具备专业化学知识并遵守相关实验室安全规程。