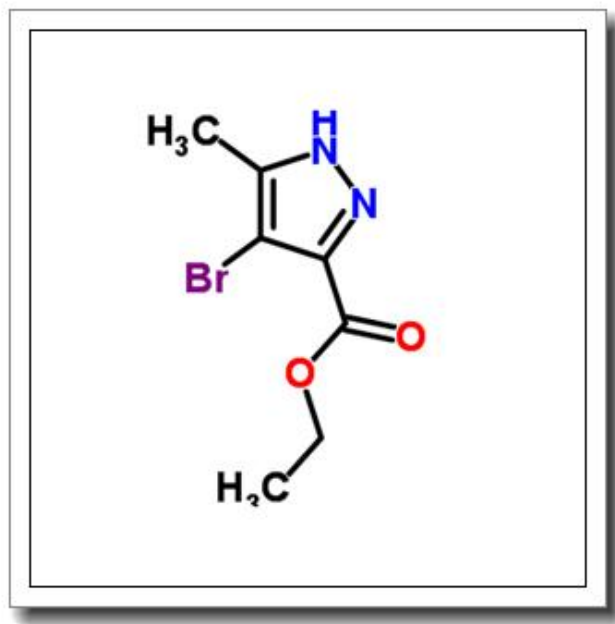


4-溴-3-甲基-1H-吡唑-5-羧酸乙酯

Ethyl 4-bromo-5-methyl-1H-pyrazole-3-carboxylate



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|---|
| 化学名称 | Ethyl 4-bromo-5-methyl-1H-pyrazole-3-carboxylate |
| 中文名称 | 4-溴-3-甲基-1H-吡唑-5-羧酸乙酯 |
| CAS 号 | 6076-14-8 |
| 分子式 | C ₇ H ₉ BrN ₂ O ₂ |
| 分子量 | 233.063 |
| 纯度 | ≥96% |

产品说明

1. 产品概述与化学特性

4-溴-3-甲基-1H-吡唑-5-羧酸乙酯 (Ethyl 4-bromo-5-methyl-1H-pyrazole-3-carboxylate) 是一种重要的吡唑类衍生物, 化学式为 $C_7H_9BrN_2O_2$, 分子量为 233.063。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, CAS 号为 6076-14-8, 纯度通常不低于 96%。其结构中含有溴原子和羧酸乙酯基团, 使其在有机合成中表现出较高的反应活性, 可作为关键中间体用于多种杂环化合物的构建。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是吡唑环结构的重要衍生物, 吡唑类化合物在药物化学和农药化学中具有广泛的应用价值。其溴取代基和酯基的存在使其易于参与亲核取代、偶联反应等转化, 为合成具有生物活性的分子 (如抗炎、抗菌或抗肿瘤药物) 提供了重要砌块。此外, 吡唑骨架本身是许多天然产物和药物的核心结构, 因此该化合物在药物研发中具有显著的重要性。

3. 主要应用领域与具体用途

4-溴-3-甲基-1H-吡唑-5-羧酸乙酯主要用于医药和农药中间体的合成。在医药领域, 它可作为合成非甾体抗炎药、抗感染药物或激酶抑制剂的起始原料。在农药化学中, 吡唑类衍生物常用于开发高效低毒的杀虫剂或除草剂。此外, 该化合物还可用于材料科学中功能分子的设计与合成。

4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于干燥、阴凉的环境中, 避免光照和潮湿。推荐储存温度为 2-8°C, 长期保存建议充氮保护。使用时应在通风良好的条件下操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明, 该化合物易溶于有机溶剂 (如乙醇、二甲基亚砜), 但在水中溶解度较低。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度 $\geq 96\%$, 并提供详细的质检报告 (COA)。安全信息方面, 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性, 操作时需佩戴防护手套、护目

镜和口罩。若不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地环保法规，建议通过专业化学品回收机构处置。