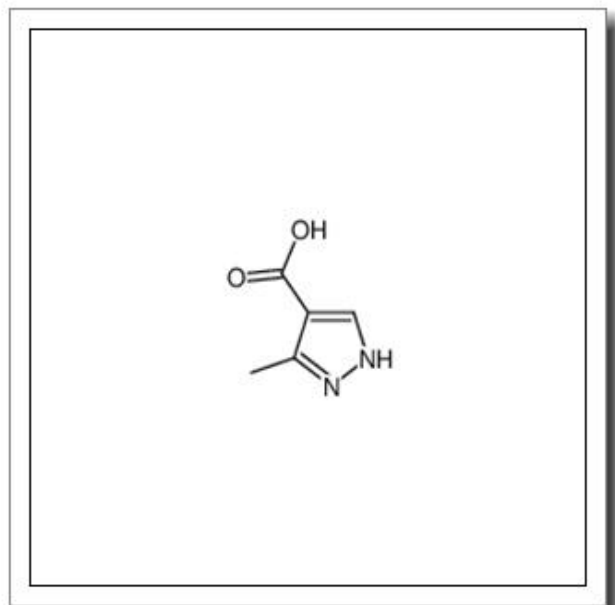


5-Methyl-1H-pyrazole-4-carboxylic acid

5-Methyl-1H-pyrazole-4-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-Methyl-1H-pyrazole-4-carboxylic acid
中文名称	5-Methyl-1H-pyrazole-4-carboxylic acid
CAS 号	1035225-22-9
分子式	C ₅ H ₆ N ₂ O ₂
分子量	126.113
纯度	≥ 96%

产品说明

5-甲基-1H-吡唑-4-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-甲基-1H-吡唑-4-羧酸 (CAS 号: 1035225-22-9) 是一种含氮杂环羧酸化合物, 分子式为 $C_5H_6N_2O_2$, 分子量 126.113。本品为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有吡唑环的典型化学性质, 包括羧酸基团的酸性和吡唑环的配位能力。其结构中甲基和羧基的协同作用使其在有机合成中表现出独特的反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是吡唑类衍生物的重要中间体, 吡唑环作为五元芳香杂环, 广泛存在于生物活性分子中。其羧酸基团可参与酯化、酰胺化等反应, 甲基的引入增强了分子的疏水性, 使其在药物设计 (如激酶抑制剂) 和农药合成 (如杀虫剂前体) 中具有关键作用。此外, 其金属配位能力可用于催化领域。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药领域, 本品用于合成抗炎、抗肿瘤药物的核心骨架; 在农业化学中, 作为新型杀虫剂 (如新烟碱类) 的构建模块。研究级用途包括作为有机合成中间体、配体或标准品, 亦可用于材料科学中功能分子的开发。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 $2-8^{\circ}C$ 干燥环境中, 避免光照和吸湿。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明其易溶于极性有机溶剂 (如 DMSO、甲醇), 水溶性较低, 建议预溶解后使用。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度, 批号关联 COA (质量分析证书)。本品对眼睛和呼吸道有轻微刺激性, 操作时应佩戴防护手套和护目镜。安全数据表 (SDS) 显示其 LD_{50} (大鼠口服) >2000 mg/kg, 属于低毒类, 但废弃物需按危险化学品规范处置。

注：本产品仅限科研用途，不可用于人体或食品相关领域。具体应用需结合实验方案进一步验证。