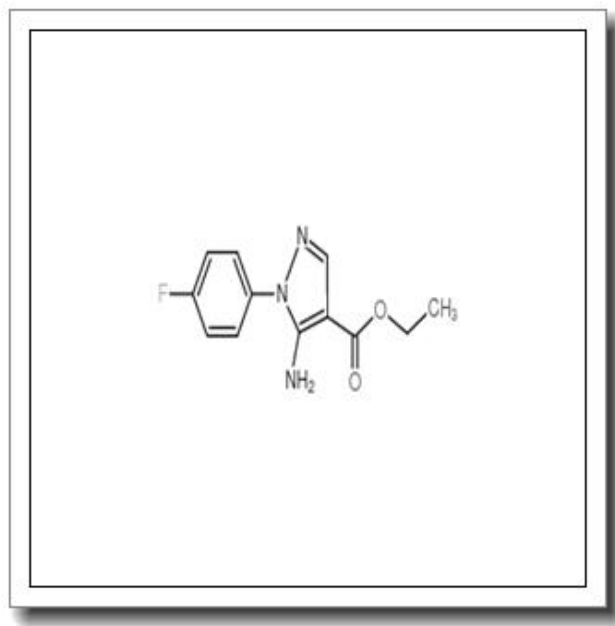


5-氨基-1-(4-氟苯)吡唑-4-羧酸乙酯

Ethyl 5-amino-1-(4-fluorophenyl)-1H-pyrazole-4-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 5-amino-1-(4-fluorophenyl)-1H-pyrazole-4-carboxylate
中文名称	5-氨基-1-(4-氟苯)吡唑-4-羧酸乙酯
CAS 号	138907-68-3
分子式	C ₁₂ H ₁₂ FN ₃ O ₂
分子量	249.241
纯度	≥96%

产品说明

5-氨基-1-(4-氟苯)吡唑-4-羧酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 Ethyl 5-amino-1-(4-fluorophenyl)-1H-pyrazole-4-carboxylate, CAS 号为 138907-68-3, 分子式为 C₁₂H₁₂FN₃O₂, 分子量 249.241。外观为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 ≥96%。该化合物属于吡唑羧酸酯衍生物, 结构中含氟苯基团和氨基活性位点, 具有显著的极性特征, 可溶于二甲基亚砜 (DMSO)、甲醇等有机溶剂, 微溶于水。

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, 其分子中的氨基和酯基赋予其良好的反应活性, 可用于构建杂环药物骨架。氟原子的引入增强了化合物的脂溶性和代谢稳定性, 使其在药物设计中具有特殊价值。该分子在抑制酶活性、调节信号通路等方面表现出潜在生物活性, 是开发抗炎、抗肿瘤药物的重要前体。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发领域, 具体包括:

- 1) 作为合成抗糖尿病药物 (如 SGLT2 抑制剂) 的中间体;
- 2) 用于构建抗病毒或抗肿瘤先导化合物;
- 3) 在农药化学中用于开发新型杀虫剂;
- 4) 作为荧光标记物或生物探针的修饰基团。实验室级产品适用于克级至公斤级规模的反应。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20℃ 至 4℃ 干燥环境中, 避免光照和潮湿。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用前需恢复至室温并充分干燥, 称量时建议在干燥环境下操作。溶解性测试表明, 推荐使用无水乙醇或 DMSO 配制成 10-50 mM 储备液, 现配现用。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 和 NMR 确保纯度 $\geq 96\%$ ，批次间差异控制在 $\pm 1\%$ 以内。该化合物对眼睛和呼吸道有轻微刺激性，操作时需佩戴防护手套和护目镜。安全数据表（SDS）显示其急性毒性为 $LD_{50} > 500 \text{ mg/kg}$ （大鼠经口），废弃物应作为有害化学品处理。若接触皮肤，立即用大量清水冲洗并就医。

注：本产品仅限科研用途，不可用于人体或食品相关领域。具体应用需进一步验证其安全性和有效性。