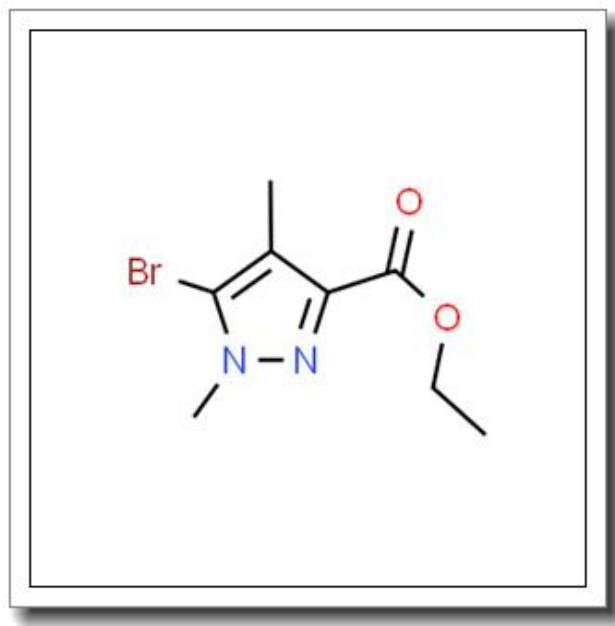


5-溴-1,4-甲基-1H-吡唑-3-羧酸乙酯

Ethyl 5-bromo-1,4-dimethyl-1H-pyrazole-3-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 5-bromo-1,4-dimethyl-1H-pyrazole-3-carboxylate
中文名称	5-溴-1,4-甲基-1H-吡唑-3-羧酸乙酯
CAS 号	1707370-05-5
分子式	C ₈ H ₁₁ BrN ₂ O ₂
分子量	247.09
纯度	≥96%

产品说明

5-溴-1,4-甲基-1H-吡唑-3-羧酸乙酯 (Ethyl 5-bromo-1,4-dimethyl-1H-pyrazole-3-carboxylate) 产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学式为 $C_8H_{11}BrN_2O_2$ ，分子量 247.09，CAS 号为 1707370-05-5。其结构包含吡唑环核心，并在 5 位引入溴原子、1 位和 4 位分别带有甲基取代基，3 位羧酸乙酯基团赋予其良好的脂溶性。纯度 $\geq 96\%$ (HPLC 测定)，熔点为 $98-102^\circ C$ ，易溶于有机溶剂如乙醇、二氯甲烷，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为溴代吡唑衍生物，该化合物是合成杂环类药物的关键中间体，其结构中的溴原子和酯基可进一步衍生化，参与偶联反应或水解反应。吡唑环在药物化学中广泛用于构建激酶抑制剂、抗炎及抗肿瘤活性分子，因此本产品在生物活性分子研发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

- 医药研发：用于构建靶向药物分子库，尤其是含吡唑结构的先导化合物优化。
- 农药化学：作为杀菌剂或杀虫剂的中间体，参与合成高效低毒农用化学品。
- 材料科学：可用于功能化聚合物的单体修饰，改善材料性能。

4. 储存条件与使用建议

- 储存于 $2-8^\circ C$ 、避光、干燥的惰性气体（如氮气）环境中，避免与氧化剂接触。
- 使用前需恢复至室温并充分干燥，建议在通风橱中操作，佩戴防护手套及护目镜。
- 溶解性测试推荐使用无水乙醇或 DMSO，浓度需根据实验需求优化。

5. 质量控制与安全信息

- 质量控制：通过 HPLC、NMR 及质谱确保纯度和结构准确性，批次检测报告随货提供。

- 安全信息: 本品对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时需遵守 GHS 标准, 标识为 GHS05 (腐蚀性)、GHS07 (刺激性)。若不慎接触, 立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地环保法规。

本产品仅限科研用途, 不适用于食品、药品或家庭用途。