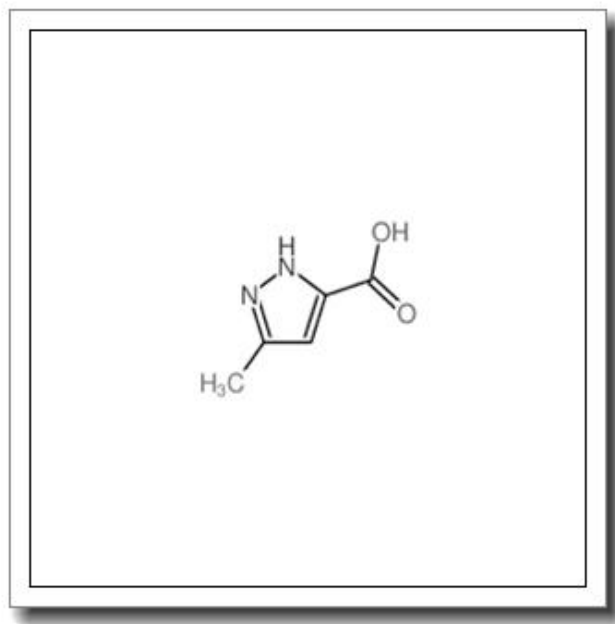


5-甲基-3-吡唑甲酸

5(or 3)-methyl-pyrazole-3(or 5)-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	5(or 3)-methyl-pyrazole-3(or 5)-carboxylic acid
中文名称	5-甲基-3-吡唑甲酸
CAS 号	696-22-0
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-3-吡唑甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-甲基-3-吡唑甲酸（英文名称：5(or 3)-methyl-pyrazole-3(or 5)-carboxylic acid）是一种重要的杂环羧酸化合物，化学式为 $C_5H_6N_2O_2$ ，分子量为 126.113。该化合物为白色至类白色结晶性粉末，CAS 号为 696-22-0，纯度 $\geq 96\%$ 。其结构包含吡唑环和羧酸基团，具有显著的酸性和配位能力，可溶于极性有机溶剂（如甲醇、乙醇），微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡唑类衍生物，5-甲基-3-吡唑甲酸是合成多种生物活性分子的关键中间体。其羧酸基团可通过酯化、酰胺化等反应进一步修饰，而吡唑环则赋予其与金属离子配位的能力。该化合物在酶抑制、药物分子设计及金属有机框架材料（MOFs）构建中具有重要价值，尤其在抗炎、抗菌类药物的研发中应用广泛。

3. 主要应用领域与具体用途

5-甲基-3-吡唑甲酸主要用于医药和材料科学领域。在医药领域，它是合成非甾体抗炎药（如塞来昔布类似物）的重要前体；在材料科学中，可作为配体用于制备功能性配合物或催化剂。此外，该化合物还可用于农药中间体及精细化学品的合成。

4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于干燥、阴凉处，避免光照和潮湿环境，推荐储存温度为 $2-8^{\circ}C$ 。使用时需佩戴防护手套和护目镜，在通风橱中操作。避免与强氧化剂接触，以防分解。开封后建议尽快使用，剩余部分应严格密封。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测，纯度 $\geq 96\%$ ，并提供完整的质检报告（COA）。安全信息方面，其急性毒性数据为 LD_{50} （大鼠经口） >2000 mg/kg，属于低毒类物质，但仍需避免吸入或皮肤直接接触。如不慎接触眼睛或皮肤，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。

注：以上信息仅供参考，具体实验条件需根据实际需求调整。