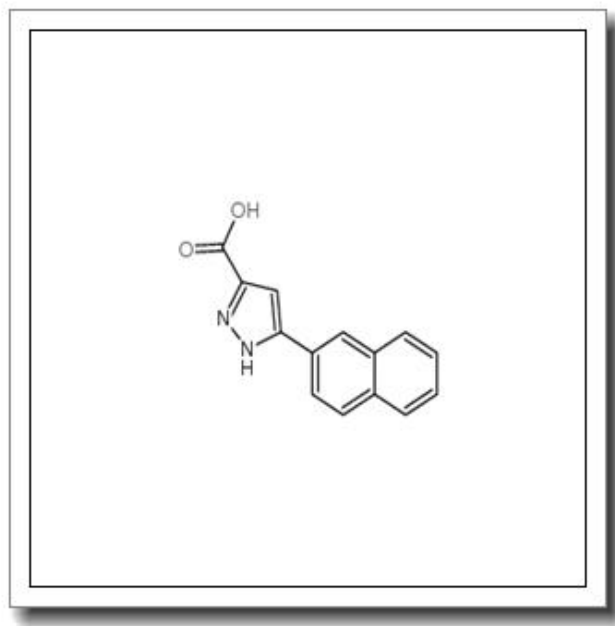


5-萘-2-基-1H-吡唑-3-羧酸

3-naphthalen-2-yl-1H-pyrazole-5-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-naphthalen-2-yl-1H-pyrazole-5-carboxylic acid
中文名称	5-萘-2-基-1H-吡唑-3-羧酸
CAS 号	164295-94-7
分子式	C ₁₄ H ₁₀ N ₂ O ₂
分子量	238.241
纯度	≥96%

产品说明

3-萘-2-基-1H-吡唑-5-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-萘-2-基-1H-吡唑-5-羧酸 (CAS 号: 164295-94-7) 是一种含萘环的吡唑羧酸衍生物, 分子式为 $C_{14}H_{10}N_2O_2$, 分子量 238.241。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有典型的芳香杂环结构特征。其化学结构中同时包含疏水性萘环和亲水性羧酸基团, 赋予其独特的双亲性质, 在有机溶剂 (如 DMSO、甲醇) 中溶解度较高, 水溶性较低。

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, 该物质可通过羧酸基团参与酰胺化、酯化等反应, 或通过吡唑环氮原子进行功能化修饰。其萘环结构可增强与生物大分子的 $\pi-\pi$ 堆积作用, 在药物化学中常用于构建激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂的药效团。此外, 其杂环骨架对开发荧光探针或金属离子螯合剂具有潜在价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域:

- 医药研发: 作为小分子抗癌药物、抗炎化合物的核心骨架, 例如用于 JAK/STAT 信号通路抑制剂的合成。
- 材料科学: 作为有机配体参与金属有机框架 (MOFs) 材料的制备。
- 分析化学: 修饰为荧光标记物用于生物传感检测。
- 学术研究: 用于杂环化合物反应机理探索或结构-活性关系 (SAR) 研究。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、避光、干燥条件下密封保存, 长期储存需充入惰性气体。使用前需恢复至室温并避免反复冻融。溶解时推荐先用 DMSO 配制母液, 再稀释至工作浓度。实验操作应在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 核磁共振 (1H NMR) 与质谱 (MS) 验证结构。安全

数据表明其具有刺激性，操作时需佩戴防护手套、护目镜及实验服。如接触皮肤，立即用大量清水冲洗；若吸入，转移至空气新鲜处。废弃物应按照危险化学品规范处置。

（注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件优化。）