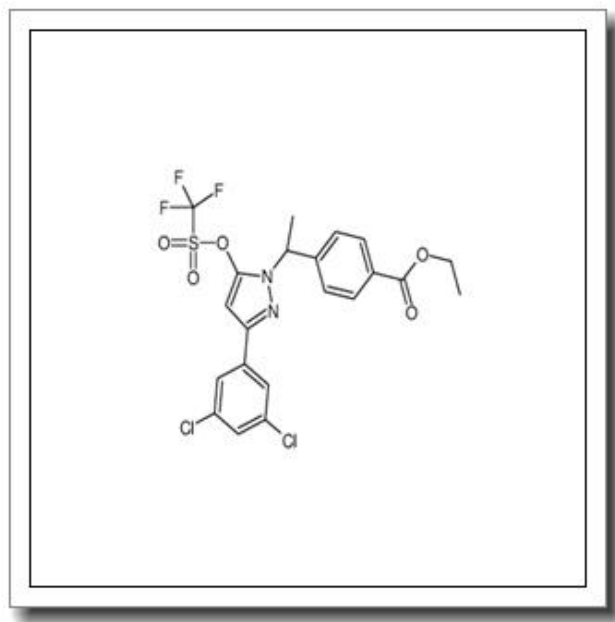


Ethyl 4-{(1S)-1-[3-(3,5-dichlorophenyl)-5-{{[(trifluoromethyl)sulfonyl]oxy}-1H-pyrazol-1-yl]ethyl}benzoate

Ethyl 4-{(1S)-1-[3-(3,5-dichlorophenyl)-5-{{[(trifluoromethyl)sulfonyl]oxy}-1H-pyrazol-1-yl]ethyl}benzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 4-{(1S)-1-[3-(3,5-dichlorophenyl)-5-{{[(trifluoromethyl)sulfonyl]oxy}-1H-pyrazol-1-yl]ethyl}benzoate
中文名称	Ethyl 4-{(1S)-1-[3-(3,5-dichlorophenyl)-5-{{[(trifluoromethyl)sulfonyl]oxy}-1H-pyrazol-1-yl]ethyl}benzoate
CAS 号	870823-09-9
分子式	C ₂₁ H ₁₇ Cl ₂ F ₃ N ₂ O ₅ S
分子量	537.336

纯度	$\geq 96\%$
----	-------------

产品说明

产品名称: Ethyl 4-{(1S)-1-[3-(3,5-dichlorophenyl)-5-
{[(trifluoromethyl)sulfonyl]oxy}-1H-pyrazol-1-yl]ethyl}benzoate

CAS 号: 870823-09-9

分子式: C₂₁H₁₇Cl₂F₃N₂O₅S

分子量: 537.336

纯度: ≥96%

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，是一种含有二氯苯基、三氟甲磺酰氧基和吡唑环的苯甲酸酯类化合物。其分子结构具有手性中心（1S 构型），并包含多个电负性基团（如 Cl、F 等），表现出较高的化学稳定性和特异性反应活性。该化合物在有机溶剂（如 DMSO、甲醇）中溶解性良好，但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡唑类衍生物，该化合物可通过抑制特定酶（如激酶或磷酸酶）的活性，干扰细胞信号传导通路。其结构中的三氟甲磺酰氧基团可作为良好的离去基团，参与亲核取代反应，因此在药物化学中常作为中间体用于构建更复杂的生物活性分子。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药研发领域，具体包括：

- 作为抗炎、抗肿瘤或抗感染药物的关键中间体；
- 用于激酶抑制剂类药物的结构修饰与优化；
- 在有机合成中作为手性砌块，构建具有生物活性的杂环化合物。

4. 储存条件与使用建议

储存条件: 需避光、密封保存于-20° C 环境中，长期储存建议充入惰性气体（如氮气）。开封后需尽快使用，避免反复冻融。

使用建议: 实验操作应在通风橱中进行，佩戴防护手套和护目镜。溶解时建议使用干燥的有机溶剂，避免与水接触以防止水解。

5. 质量控制与安全信息

质量控制：通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，并符合核磁共振（NMR）和质谱（MS）的结构确证标准。

安全信息：本品对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性，可能引起过敏反应。若不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。

本产品仅限科研用途，不可用于人体或动物实验。