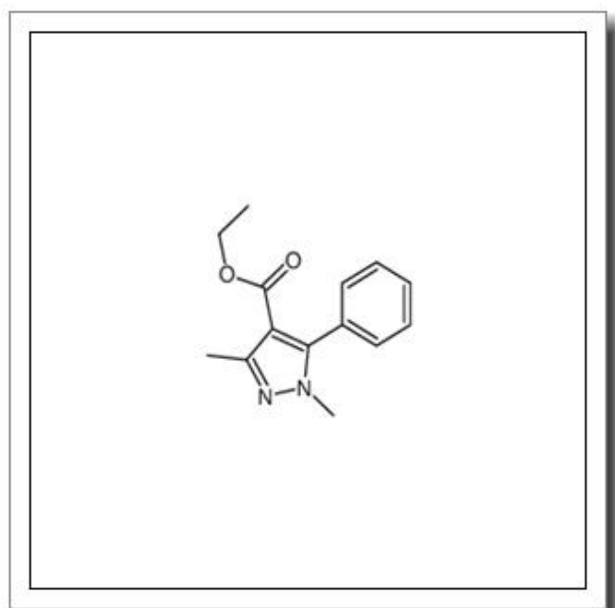


ethyl 1,3-dimethyl-5-phenylpyrazole-4-carboxylate

ethyl 1,3-dimethyl-5-phenylpyrazole-4-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 1,3-dimethyl-5-phenylpyrazole-4-carboxylate
中文名称	ethyl 1,3-dimethyl-5-phenylpyrazole-4-carboxylate
CAS 号	77435-42-8
分子式	C ₁₄ H ₁₆ N ₂ O ₂
分子量	244.289
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

ethyl 1,3-dimethyl-5-phenylpyrazole-4-carboxylate (CAS 号: 77435-42-8) 是一种有机化合物, 分子式为 $C_{14}H_{16}N_2O_2$, 分子量为 244.289。该化合物属于吡唑类衍生物, 结构中含有苯基和酯基官能团, 纯度通常不低于 96%。其化学性质稳定, 常温下为白色至类白色结晶或粉末, 可溶于常见有机溶剂如乙醇、乙醚和二甲基亚砜 (DMSO), 但不溶于水。该化合物在酸性或碱性条件下可能发生水解反应, 需避免强酸强碱环境。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡唑类化合物, 该物质在生物化学领域具有重要的应用价值。吡唑环结构是许多药物和生物活性分子的核心骨架, 能够参与多种生物代谢途径。其苯基和酯基的引入进一步增强了分子的疏水性和反应活性, 使其在药物合成和材料科学中具有广泛的应用潜力。该化合物可能作为中间体用于合成具有抗菌、抗炎或抗肿瘤活性的药物分子。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于医药研发和有机合成领域。在医药化学中, 它可作为关键中间体用于合成吡唑类非甾体抗炎药 (NSAIDs) 或其他靶向药物。在材料科学中, 其苯基吡唑结构可用于制备功能性高分子材料或液晶材料。此外, 它还可能在农药和染料工业中作为合成前体使用。具体实验用途包括但不限于: 药物先导化合物的结构修饰、杂环化合物的合成研究以及生物活性筛选实验。

4. 储存条件与使用建议

建议将产品密封保存于干燥、阴凉的环境中, 理想储存温度为 $2-8^{\circ}C$, 长期保存可考虑置于惰性气体保护下。开封后应尽快使用, 避免反复冻融或暴露于潮湿空气。使用时需在通风良好的条件下操作, 佩戴适当的个人防护装备 (如手套、护目镜和实验服)。溶解时建议使用无水有机溶剂, 并根据实验需求严格控制反应条件, 避免高温或强酸强碱环境。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测，纯度 $\geq 96\%$ ，符合科研级试剂标准。使用前建议通过 TLC 或 NMR 进行验证。安全方面，该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激，操作时应避免直接接触。如不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需遵守当地化学品处置法规，不可直接排入下水道。详细安全数据请参考产品附带的 MSDS（材料安全数据表）。