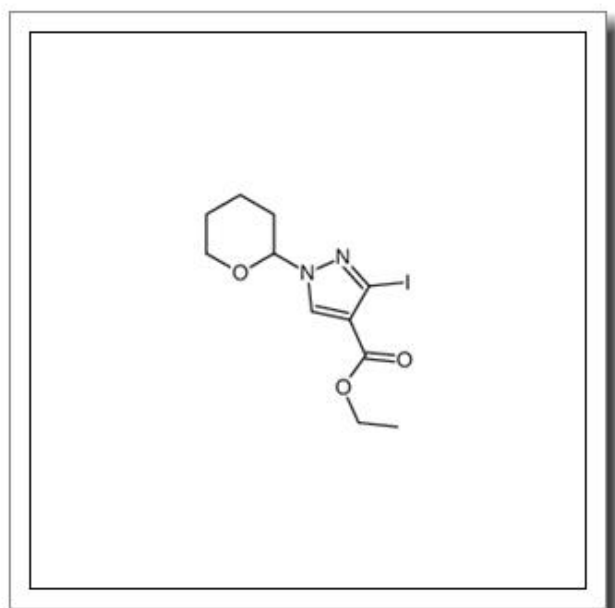


# ethyl 3-iodo-1-(oxan-2-yl)pyrazole-4-carboxylate

*ethyl 3-iodo-1-(oxan-2-yl)pyrazole-4-carboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 3-iodo-1-(oxan-2-yl)pyrazole-4-carboxylate
中文名称	ethyl 3-iodo-1-(oxan-2-yl)pyrazole-4-carboxylate
CAS 号	1190060-37-7
分子式	C <sub>11</sub> H <sub>15</sub> IN <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
分子量	350.153
纯度	≥ 96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

ethyl 3-iodo-1-(oxan-2-yl)pyrazole-4-carboxylate (CAS 号: 1190060-37-7) 是一种吡唑类衍生物, 分子式为  $C_{11}H_{15}IN_2O_3$ , 分子量为 350.153。该化合物以白色至浅黄色结晶或粉末形式存在, 纯度通常不低于 96%。其结构特征包括吡唑环上的碘取代基和四氢吡喃 (oxan-2-yl) 保护基, 以及乙酯基团, 这些官能团赋予其良好的反应活性和溶解性, 适用于有机合成与药物化学研究。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为重要的医药中间体, 其吡唑骨架和碘取代基在生物活性分子构建中具有关键作用。吡唑类化合物广泛参与激酶抑制、抗炎和抗肿瘤等生物活性研究, 而碘原子的引入可进一步通过交叉偶联反应 (如 Suzuki 或 Sonogashira 反应) 扩展分子多样性。其在药物发现和先导化合物优化中具有潜在应用价值。

### 3. 主要应用领域与具体用途

ethyl 3-iodo-1-(oxan-2-yl)pyrazole-4-carboxylate 主要用于以下领域:

- 药物研发: 作为构建复杂杂环化合物的关键中间体, 用于合成靶向抗癌或抗感染药物。
- 有机合成: 通过碘原子的官能团转化, 制备功能化吡唑衍生物, 如芳基化或炔基化产物。
- 材料科学: 参与配体设计或金属有机框架 (MOF) 材料的合成。

### 4. 储存条件与使用建议

该化合物需避光、密封保存于干燥环境中, 推荐储存温度为 2-8° C, 长期保存建议充氮保护。使用时需在惰性气体 (如氮气或氩气) 氛围下操作, 避免接触强氧化剂或潮湿环境。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和氯仿, 微溶于水。

### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测, 确保纯度  $\geq 96\%$ 。安全信息如下:

- 危险性: 可能对眼睛、皮肤和呼吸道造成刺激, 操作时需佩戴防护手套、护目镜

及防尘口罩。

- 应急处理：如接触皮肤，立即用大量清水冲洗；若吸入，移至通风处并就医。
- 废弃物处置：按危险化学品规范处理，避免直接排放至环境。

以上信息仅供参考，具体实验设计需结合文献与安全规程进行。