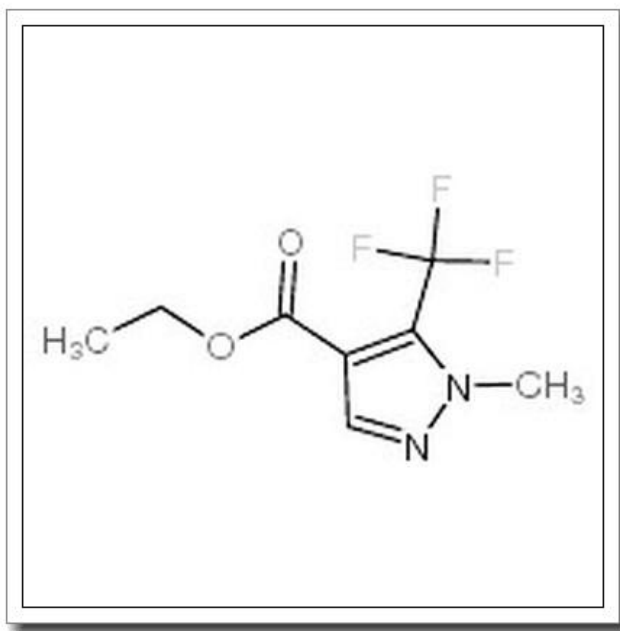


1-甲基-3-三氟甲基-1H-吡唑-4-羧酸乙酯

Ethyl 1-Methyl-3-(Trifluoromethyl)-1H-Pyrazole-4-Carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 1-Methyl-3-(Trifluoromethyl)-1H-Pyrazole-4-Carboxylate
中文名称	1-甲基-3-三氟甲基-1H-吡唑-4-羧酸乙酯
CAS 号	111493-74-4
分子式	C ₈ H ₉ F ₃ N ₂ O ₂
分子量	222.164
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-甲基-3-三氟甲基-1H-吡唑-4-羧酸乙酯 (Ethyl 1-Methyl-3-(Trifluoromethyl)-1H-Pyrazole-4-Carboxylate) 是一种含氟吡唑类化合物, CAS 号为 111493-74-4, 分子式为 C₈H₉F₃N₂O₂, 分子量为 222.164。该化合物为无色至淡黄色液体或固体, 纯度通常高于 96%。其结构中的三氟甲基和吡唑环赋予其独特的化学稳定性与反应活性, 使其在有机合成中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为吡唑羧酸酯衍生物, 其分子结构中的三氟甲基可显著增强其脂溶性和代谢稳定性, 因此在药物化学和农药化学中常作为关键中间体。其吡唑环结构能够与多种生物靶点相互作用, 在抑制酶活性或调节信号通路中发挥潜在作用。

3. 主要应用领域与具体用途

1-甲基-3-三氟甲基-1H-吡唑-4-羧酸乙酯广泛应用于医药、农药及材料科学领域。在医药研发中, 它常用于合成抗炎、抗肿瘤或抗感染药物的活性分子片段。在农药领域, 它是制备高效杀虫剂或除草剂的重要前体。此外, 该化合物还可用于功能性材料的合成, 如液晶材料或特种高分子单体。

4. 储存条件与使用建议

该产品需密封保存于干燥、阴凉的环境中, 推荐储存温度为 2-8° C, 避免光照与潮湿。使用时应穿戴防护手套和护目镜, 并在通风良好的条件下操作。开封后建议尽快使用, 剩余产品需重新密封以防止降解。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 等严格分析方法确保纯度 >96%。安全信息方面, 该化合物可能对皮肤、眼睛和呼吸道有刺激性, 操作时需避免直接接触。若不慎接触, 应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照国家法规进行专业处理。

以上信息仅供参考, 具体应用需结合实验需求与安全规范。