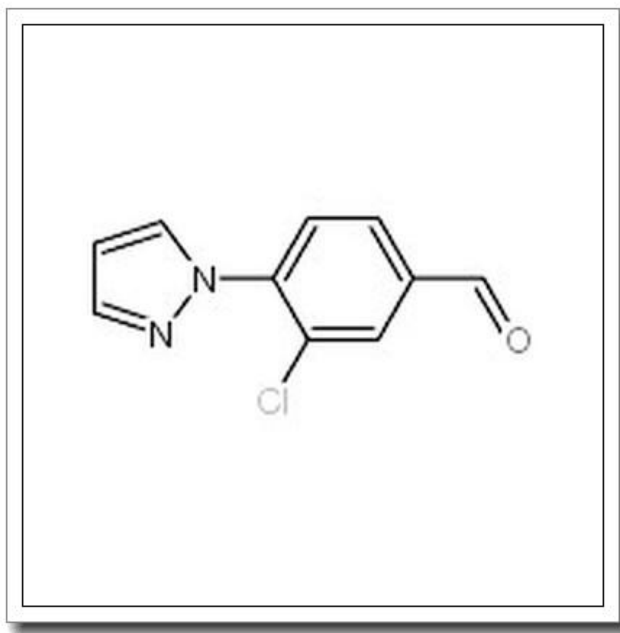


3-氯-4-(1-吡唑基)苯甲醛

3-Chloro-4-(1-pyrazolyl)benzaldehyde



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-Chloro-4-(1-pyrazolyl)benzaldehyde
中文名称	3-氯-4-(1-吡唑基)苯甲醛
CAS 号	1186663-52-4
分子式	C ₁₀ H ₇ ClN ₂ O
分子量	206.628
纯度	>96%

产品说明

3-氯-4-(1-吡唑基)苯甲醛产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-氯-4-(1-吡唑基)苯甲醛 (英文名: 3-Chloro-4-(1-pyrazolyl)benzaldehyde) 是一种重要的芳香醛类化合物, 化学式为 $C_{10}H_7ClN_2O$, 分子量 206.628, CAS 号为 1186663-52-4。该化合物以白色至淡黄色结晶或粉末形式存在, 纯度通常高于 96%。其结构中的氯原子和吡唑基团赋予其独特的反应活性, 使其在有机合成和药物化学中具有广泛的应用价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为多功能中间体, 其醛基可与胺类、醇类等发生缩合反应, 形成席夫碱或杂环结构。吡唑基团的存在增强了其与生物靶标的相互作用潜力, 使其在药物研发中常用于构建激酶抑制剂或抗炎药物的核心骨架。此外, 氯原子的引入进一步提高了化合物的稳定性和脂溶性, 有利于其在生物体系中的渗透性。

3. 主要应用领域与具体用途

3-氯-4-(1-吡唑基)苯甲醛主要用于医药和农药中间体的合成。在药物化学领域, 它是构建抗肿瘤、抗病毒及中枢神经系统药物的重要前体。例如, 可用于合成吡唑并嘧啶类衍生物, 这类结构常见于 EGFR 抑制剂的设计中。在农业化学中, 该化合物可作为杀菌剂或杀虫剂的活性成分修饰基团。此外, 其也用于材料科学中功能化聚合物的制备。

4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于干燥、避光的环境中, 推荐储存温度为 $2-8^{\circ}C$, 长期存放建议充氮保护。使用时应避免与强氧化剂、强酸或强碱接触。操作时需佩戴防护手套、护目镜及实验服, 并在通风橱中进行。若需溶解, 推荐使用二甲基亚砜 (DMSO) 或二氯甲烷等有机溶剂, 溶解后建议尽快使用以减少降解风险。

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 $\geq 96\%$ 。MSDS 数据显示其具有刺激

性，可能引起皮肤、眼睛和呼吸道不适。若不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地化学品管理法规，禁止直接排放至环境中。运输时需分类为有害化学品，并标注 UN 编号。

注：以上信息基于现有实验数据，具体应用需进一步验证。建议用户根据实际需求开展小试实验以优化反应条件。