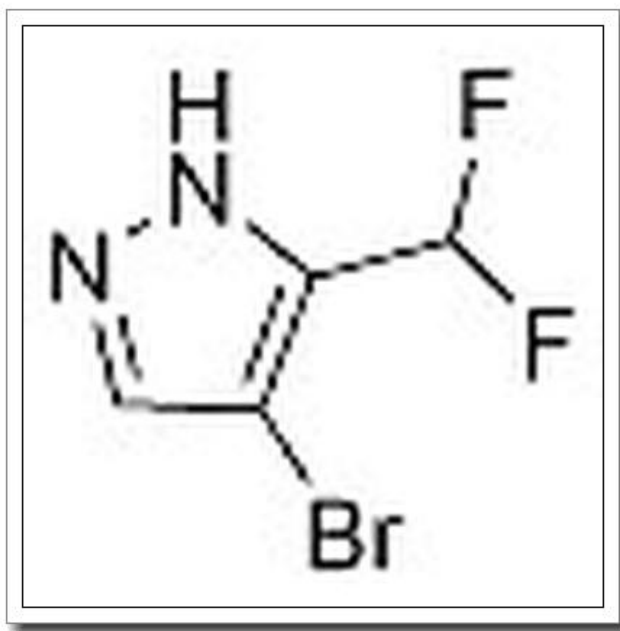


4-bromo-5-(difluoromethyl)-1H-pyrazole

4-bromo-5-(difluoromethyl)-1H-pyrazole



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-bromo-5-(difluoromethyl)-1H-pyrazole
中文名称	4-bromo-5-(difluoromethyl)-1H-pyrazole
CAS 号	1451392-65-6
分子式	C ₄ H ₃ BrF ₂ N ₂
分子量	196.9808264
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

4-溴-5-(二氟甲基)-1H-吡唑 (CAS 号: 1451392-65-6) 是一种含溴和氟的吡唑类有机化合物, 分子式为 $C_4H_3BrF_2N_2$, 分子量为 196.98。该化合物具有高纯度 (>96%), 常温下为白色至类白色固体, 可溶于常见有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO)、甲醇和乙腈。其结构中的溴原子和二氟甲基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重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为吡唑衍生物, 可通过亲核取代或偶联反应参与多种生物活性分子的构建。二氟甲基的引入可增强化合物的代谢稳定性和脂溶性, 而溴原子则为后续官能团化提供了关键位点。这类结构单元常见于农药、医药中间体的设计中, 尤其在抗肿瘤、抗炎和抗感染药物的研发中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

4-溴-5-(二氟甲基)-1H-吡唑主要用于以下领域:

- 医药中间体: 作为构建含氟杂环化合物的关键原料, 用于合成具有生物活性的候选药物分子。
- 农药化学: 作为高效杀虫剂或杀菌剂的中间体, 优化靶标分子的理化性质。
- 材料科学: 参与功能化聚合物的合成, 改善材料的耐候性或表面性能。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光保存, 长期储存需充惰性气体保护。开封后应避免反复冻融, 以防降解。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明, 推荐使用 DMSO 配制高浓度母液, 再进一步稀释至工作浓度。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确认纯度 >96%, 并提供批次相关的质谱 (MS) 和核磁 (NMR) 数据支持。安全信息如下:

- 危害提示: 可能对皮肤、眼睛和呼吸道产生刺激, 避免直接接触。

- 应急处理：如接触皮肤，立即用大量清水冲洗；若吸入，移至空气新鲜处并就医。
- 运输分类：按非危险化学品运输，但仍需避免剧烈碰撞和高温环境。

（全文共计 436 字）