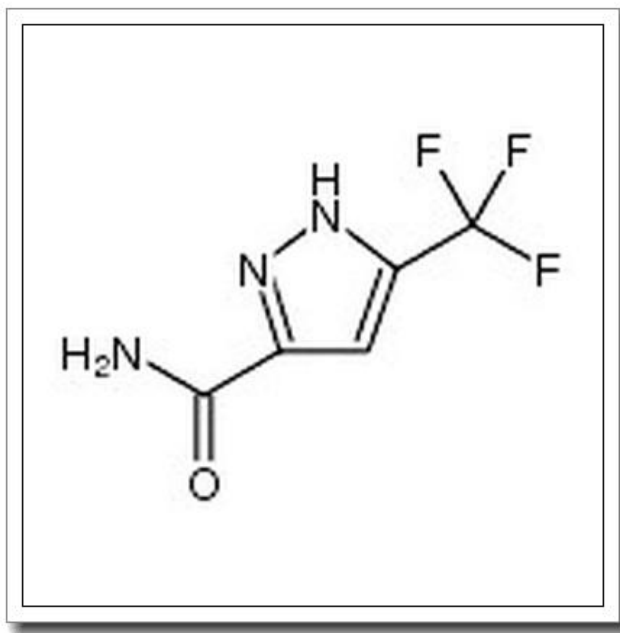


# 5-三氟甲基吡唑-3-甲酰胺

*1H- Pyrazole- 3- carboxamide, 5- (trifluoromethyl)*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	1H- Pyrazole- 3- carboxamide, 5- (trifluoromethyl)
中文名称	5-三氟甲基吡唑-3-甲酰胺
CAS 号	1276541-94-6
分子式	C5H4F3N3O
分子量	179.1
纯度	>96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

1H-吡唑-3-甲酰胺，5-三氟甲基（化学名称：5-(Trifluoromethyl)-1H-pyrazole-3-carboxamide）是一种含氟杂环化合物，CAS 号为 1276541-94-6，分子式为 C<sub>5</sub>H<sub>4</sub>F<sub>3</sub>N<sub>3</sub>O，分子量为 179.1。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在，纯度高于 96%，具有稳定的化学性质。其结构中的三氟甲基（-CF<sub>3</sub>）和吡唑环赋予其独特的电子效应和空间位阻，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

5-三氟甲基吡唑-3-甲酰胺是吡唑类衍生物的重要中间体，其结构中的酰胺基团和三氟甲基使其能够参与多种生物活性分子的构建。三氟甲基的强吸电子特性可显著改变分子的脂溶性和代谢稳定性，因此在药物设计中常用于优化先导化合物的药代动力学性质。该化合物在酶抑制、受体拮抗等生物化学研究中表现出潜在活性，尤其在抗炎、抗肿瘤和抗感染药物开发中备受关注。

### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药和农药领域的研发与生产。在医药领域，它是合成新型抗病毒药物（如 HCV 蛋白酶抑制剂）和激酶抑制剂的关键砌块。在农药领域，可作为高效杀虫剂和杀菌剂的中间体。此外，在材料科学中，其含氟特性可用于制备特殊功能的聚合物或液晶材料。实验室中常用于结构-活性关系（SAR）研究和杂环化合物库的构建。

### 4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光密封保存，长期储存需充惰性气体保护。开封后应尽快使用，避免反复冻融。使用时需在干燥环境中操作，防止吸湿。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜（DMSO），微溶于甲醇和乙醇，不溶于水。实验过程中建议佩戴防护手套、护目镜，并在通风橱中操作。

### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 ≥96%，MS 和 NMR 验证结构。安全数据表明其急性毒性

较低 ( $LD_{50} > 500 \text{ mg/kg}$ )，但仍需避免吸入粉尘或接触皮肤。如意外接触，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，不可直接排入下水道。提供完整的 COA（分析证书）和 MSDS（材料安全数据表），确保用户可追溯质量与安全信息。