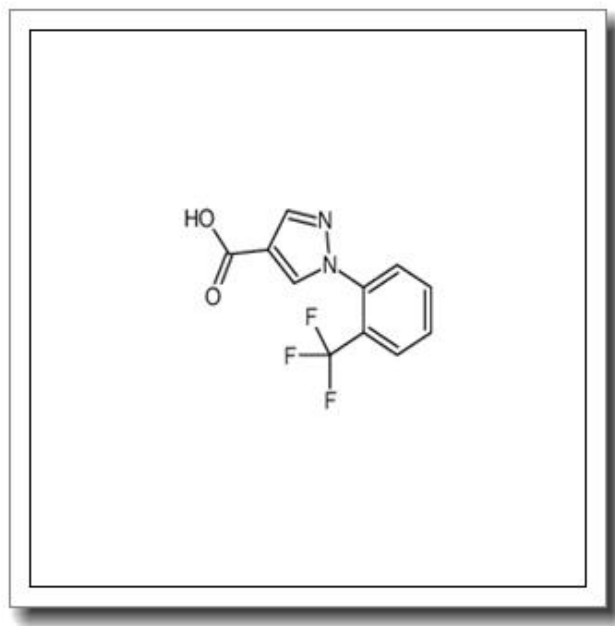


1-(2-(三氟甲基)苯基)-1H-吡唑-4-羧酸

1-[2-(trifluoromethyl)phenyl]pyrazole-4-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-[2-(trifluoromethyl)phenyl]pyrazole-4-carboxylic acid
中文名称	1-(2-(三氟甲基)苯基)-1H-吡唑-4-羧酸
CAS 号	1260855-51-3
分子式	C ₁₁ H ₇ F ₃ N ₂ O ₂
分子量	256.181
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-[2-(三氟甲基)苯基]-1H-吡唑-4-羧酸 (CAS 号: 1260855-51-3) 是一种含三氟甲基的吡唑羧酸衍生物, 分子式为 $C_{11}H_7F_3N_2O_2$, 分子量为 256.181。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有稳定的化学性质。其结构中的三氟甲基和羧酸基团赋予其独特的极性和反应活性, 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

该化合物作为吡唑类衍生物, 可通过羧酸基团参与酯化、酰胺化等反应, 或通过吡唑环与其他分子构建杂环结构。其三氟甲基的强吸电子效应可调节分子的电子分布, 影响其与生物靶标的相互作用, 因此在药物设计和生物活性分子开发中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

1-[2-(三氟甲基)苯基]-1H-吡唑-4-羧酸主要用于医药中间体和农药化学品的合成。在药物研发中, 可作为构建抗炎、抗肿瘤或抗菌活性分子的关键片段; 在农药领域, 可用于合成高效杀虫剂或除草剂的活性成分。此外, 它还可作为有机合成中的砌块, 用于复杂分子的结构修饰。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品密封保存于干燥、阴凉的环境中, 避免光照和潮湿, 储存温度以 $2-8^{\circ}C$ 为宜。使用时应穿戴防护手套和护目镜, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明, 该化合物易溶于极性有机溶剂 (如 DMSO、甲醇), 使用时需根据实验需求选择合适的溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度 $\geq 96\%$, 并提供 COA (质量分析证书)。其安全性数据需参考 MSDS (材料安全数据表), 操作时需在通风橱中进行。该化合物可能对眼

睛和皮肤有刺激性，若不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照当地法规处理，避免环境污染。