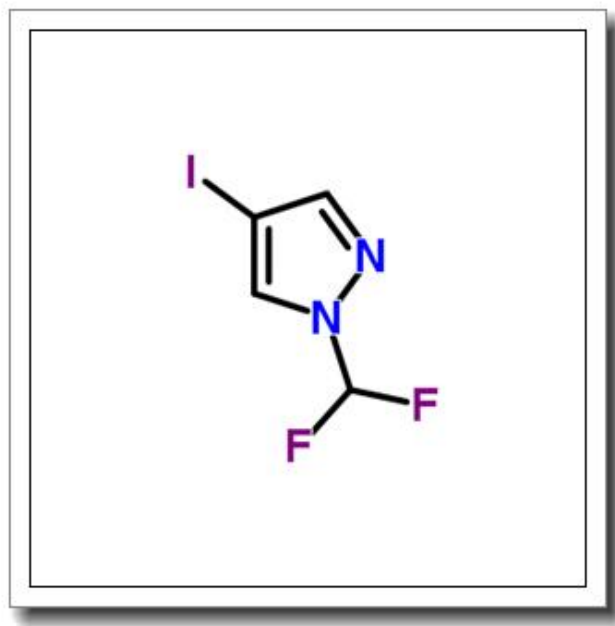


# 1-(二氟甲基)-4-碘-1H-吡唑

*1-(difluoromethyl)-4-iodopyrazole*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	1-(difluoromethyl)-4-iodopyrazole
中文名称	1-(二氟甲基)-4-碘-1H-吡唑
CAS 号	1041205-43-9
分子式	C <sub>4</sub> H <sub>3</sub> F <sub>2</sub> IN <sub>2</sub>
分子量	243.981
纯度	≥ 96%

## 产品说明

### 1-(二氟甲基)-4-碘-1H-吡唑产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

1-(二氟甲基)-4-碘-1H-吡唑（化学名称：1-(difluoromethyl)-4-iodopyrazole，CAS 号：1041205-43-9）是一种含碘和氟的吡唑类有机化合物，分子式为  $C_4H_3F_2IN_2$ ，分子量为 243.981。该化合物为白色至浅黄色结晶或粉末，纯度  $\geq 96\%$ ，具有较高的化学稳定性和反应活性。其结构中的二氟甲基和碘原子使其在有机合成和药物化学中具有独特的应用价值。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为重要的有机合成中间体，其分子中的碘原子可参与偶联反应（如 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 偶联等），而二氟甲基的引入可显著改善衍生物的代谢稳定性和脂溶性。在药物研发中，含氟和碘的杂环化合物常被用于设计靶向酶抑制剂或受体调节剂，尤其在抗肿瘤、抗炎和中枢神经系统药物开发中具有潜在应用价值。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

1-(二氟甲基)-4-碘-1H-吡唑主要用于以下领域：

- （1）药物化学：作为关键中间体用于合成含氟或含碘的活性药物分子（API）。
- （2）材料科学：参与制备功能性有机材料，如液晶分子或光电材料前体。
- （3）农业化学：用于开发新型含氟农药或植物生长调节剂。
- （4）学术研究：作为探针分子研究卤键相互作用或氟效应机制。

#### 4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，避光、防潮，建议温度  $-20^{\circ}C$  至  $4^{\circ}C$  保存。长期储存需充入惰性气体（如氮气）保护。使用时应在通风橱中操作，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二甲基亚砜（DMSO）、N,N-二甲基甲酰胺（DMF），微溶于醇类溶剂。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ ，同时提供核磁共振（NMR）和质谱（MS）数据以确证结构。安全信息：

- （1）危害声明：可能造成皮肤刺激、严重眼睛刺激，对水生生物有毒。
- （2）防护措施：佩戴防护手套、护目镜和防尘口罩，操作后彻底清洗暴露部位。
- （3）废弃物处理：按危险化学品规范处置，不可直接排入环境。

本产品仅供科研用途，不适用于医药、食品或家庭使用。具体应用前请查阅最新文献并评估合规性。