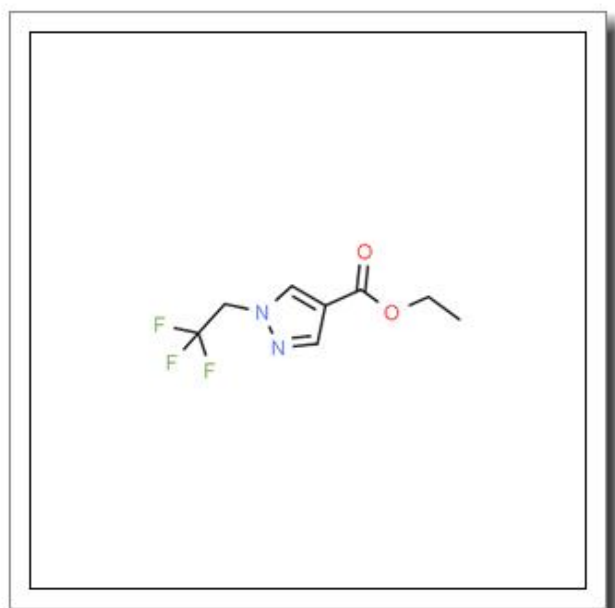


1H-Pyrazole-4-carboxylic acid, 1-(2,2,2-trifluoroethyl)-, ethyl ester

1H-Pyrazole-4-carboxylic acid, 1-(2,2,2-trifluoroethyl)-, ethyl ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	1H-Pyrazole-4-carboxylic acid, 1-(2,2,2-trifluoroethyl)-, ethyl ester
中文名称	1H-Pyrazole-4-carboxylic acid, 1-(2,2,2-trifluoroethyl)-, ethyl ester
CAS 号	1103425-07-5
分子式	C ₈ H ₉ F ₃ N ₂ O ₂
分子量	222.16
纯度	≥ 96%

产品说明

1H-Pyrazole-4-carboxylic acid, 1-(2,2,2-trifluoroethyl)-, ethyl ester 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 1H-吡唑-4-羧酸-1-(2,2,2-三氟乙基)乙酯, CAS 号为 1103425-07-5, 分子式为 C₈H₉F₃N₂O₂, 分子量为 222.16。该化合物是一种含氟吡唑衍生物, 常温下为无色至淡黄色液体或低熔点固体, 具有酯类特征气味。其纯度 ≥96%, 结构中的三氟乙基和酯基赋予其独特的化学稳定性与反应活性, 适合作为有机合成中间体或生物活性分子骨架。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡唑类化合物, 该分子可通过氢键和疏水相互作用与生物靶点结合, 其三氟乙基的强电负性可增强脂溶性和代谢稳定性。在药物化学中, 吡唑骨架常见于激酶抑制剂、抗炎剂及抗肿瘤药物的设计中, 而三氟甲基的引入能显著改善化合物的药代动力学性质。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发和精细化工领域。在医药方面, 可作为合成抗病毒药物 (如 HCV 蛋白酶抑制剂) 或中枢神经系统药物的关键中间体。在材料科学中, 可用于制备含氟液晶或高分子改性剂。此外, 其酯基可通过水解或氨解反应进一步衍生化, 扩展应用范围。

4. 储存条件与使用建议

建议密封储存于 -20°C 至 4°C 的干燥环境中, 避免光照与湿气。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时应佩戴防护手套、护目镜, 并在通风橱中操作。溶解性测试表明易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 水溶性较低, 配制时需选择合适溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, 批次间一致性严格把控。安全数据表明其对眼睛和

皮肤有刺激性，操作时需避免直接接触。如发生泄漏，需用惰性吸附材料处理并按规定处置废弃物。运输分类为非危险品，但建议符合化学品通用运输标准。

注：具体实验方案请结合文献方法优化，使用前务必查阅最新版物质安全数据表（MSDS）。