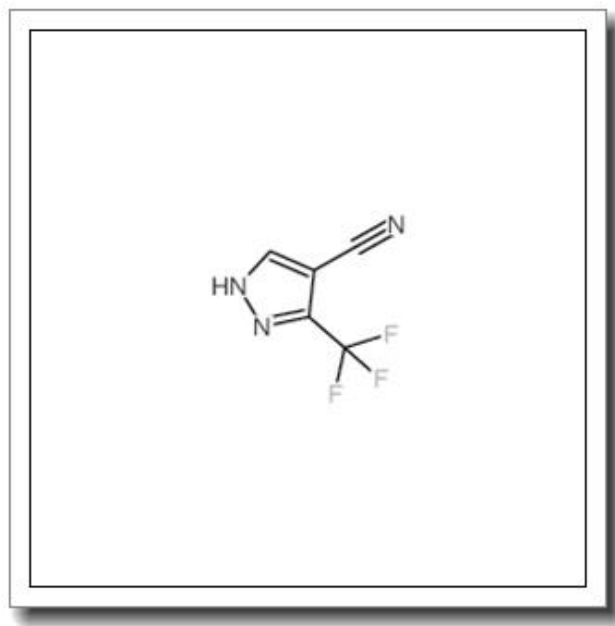


# 3-(三氟甲基)-1H-吡唑-4-甲腈

*5-(trifluoromethyl)-1H-pyrazole-4-carbonitrile*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	5-(trifluoromethyl)-1H-pyrazole-4-carbonitrile
中文名称	3-(三氟甲基)-1H-吡唑-4-甲腈
CAS 号	318951-60-9
分子式	C <sub>5</sub> H <sub>2</sub> F <sub>3</sub> N <sub>3</sub>
分子量	161.085
纯度	≥96%

## 产品说明

### 5-(三氟甲基)-1H-吡唑-4-甲腈产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

5-(三氟甲基)-1H-吡唑-4-甲腈 (英文名称: 5-(trifluoromethyl)-1H-pyrazole-4-carbonitrile) 是一种含氟杂环化合物, CAS 号为 318951-60-9, 分子式  $C_5H_2F_3N_3$ , 分子量 161.085。本品为白色至类白色结晶粉末, 纯度  $\geq 96\%$ , 具有吡唑环和氰基的典型反应活性, 同时三氟甲基的引入赋予其独特的电子效应和疏水性。其熔点和沸点数据需进一步测定, 但可溶于常见有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为吡唑类衍生物, 在药物化学和农药合成中具有重要价值。三氟甲基的强吸电子特性可显著调节分子极性及其代谢稳定性, 而氰基则提供了进一步官能团转化的位点。其结构特征使其成为构建抗炎、抗肿瘤或抗菌活性分子的关键中间体, 尤其在靶向酶抑制剂的开发中潜力突出。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药和农用化学品研发领域。在医药方向, 可作为激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体 (GPCR) 调节剂的合成前体; 在农药领域, 常用于制备高效杀虫剂或除草剂的含氟活性成分。此外, 在材料科学中也可用于含氟功能分子的构建。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于  $-20^{\circ}\text{C}$  至  $4^{\circ}\text{C}$  的干燥环境中, 避免光照和潮湿。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时应在通风橱中操作, 避免直接吸入粉尘或接触皮肤。溶解性测试推荐优先使用 DMSO, 工作液建议现配现用。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ , 批次间质量稳定。安全数据表明其具有刺激性, 操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。若意外接触眼睛, 应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地化学品管理法规, 不可直接排入下水道。

(注: 本说明基于现有实验数据撰写, 具体应用需结合用户实验体系进一步验证。)