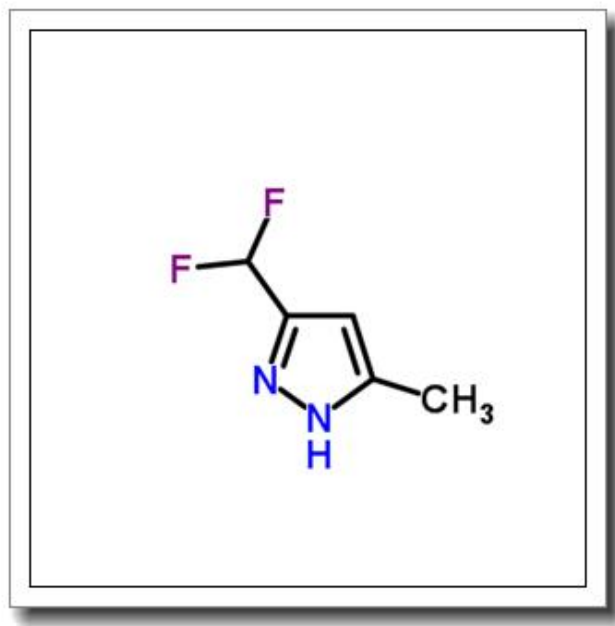


3-(二氟甲基)-5-甲基-1H-吡唑

3-(Difluoromethyl)-5-methyl-1H-pyrazole



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-(Difluoromethyl)-5-methyl-1H-pyrazole
中文名称	3-(二氟甲基)-5-甲基-1H-吡唑
CAS 号	934759-09-8
分子式	C ₅ H ₆ F ₂ N ₂
分子量	132.111
纯度	≥96%

产品说明

3-(二氟甲基)-5-甲基-1H-吡唑产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 3-(二氟甲基)-5-甲基-1H-吡唑，CAS 号为 934759-09-8，分子式 C₅H₆F₂N₂，分子量 132.111。其纯度经高效液相色谱（HPLC）测定不低于 96%，具有明确的化学结构和稳定的理化性质。该化合物属于吡唑类衍生物，其分子中的二氟甲基基团赋予其独特的电子效应和生物活性，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

作为吡唑类化合物的代表性成员，本品可通过参与氢键形成和疏水相互作用，与生物体内的酶或受体结合。二氟甲基的引入显著增强了其代谢稳定性和脂溶性，使其在药物分子设计中成为关键的药效团。此外，该结构单元在调控分子极性、改善生物利用度方面表现出显著优势，是开发新型抗菌剂、抗炎药及农药活性成分的重要中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药和农业化学领域。在医药研发中，它可作为激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂的核心骨架，用于治疗肿瘤和自身免疫性疾病。在农药领域，其衍生物常用于合成高效杀虫剂和杀菌剂，如琥珀酸脱氢酶抑制剂（SDHI）类农药的前体。此外，在材料科学中，该化合物还可用于制备含氟高分子材料的单体。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C、避光、干燥的条件下密封保存，长期储存需充入惰性气体（如氮气）保护。使用时需在干燥环境中操作，避免与强氧化剂或酸碱物质接触。溶解性测试表明，本品易溶于二甲基亚砜（DMSO）和甲醇，但在水中溶解度较低，推荐使用有机溶剂配制母液。实验操作时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。

5. 质量控制与安全信息

本产品经核磁共振（NMR）、质谱（MS）及元素分析（EA）验证结构，批次间纯度

偏差不超过 1%。安全数据表明，其急性毒性（LD50）为大鼠经口>500 mg/kg，属于低毒类物质，但仍可能对眼睛和呼吸道产生刺激。废弃物处置需符合当地环保法规，建议通过专业化学废弃物回收渠道处理。

注：以上信息基于现有实验数据，实际应用前请查阅最新文献或进行小试验证。