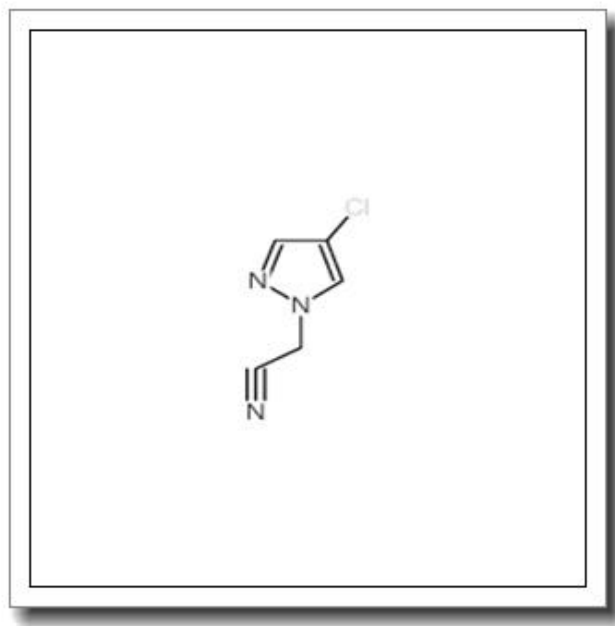


(4-氯-1H-吡唑-1-基)乙腈

2-(4-chloropyrazol-1-yl)acetonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(4-chloropyrazol-1-yl)acetonitrile
中文名称	(4-氯-1H-吡唑-1-基)乙腈
CAS 号	113336-23-5
分子式	C5H4ClN3
分子量	141.558
纯度	≥96%

产品说明

2-(4-氯吡唑-1-基)乙腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-(4-氯吡唑-1-基)乙腈 (CAS 113336-23-5) 是一种含氯吡唑衍生物, 分子式为 $C_5H_4ClN_3$, 分子量 141.558。本品为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有典型腈类化合物的极性特征, 可溶于常见有机溶剂如甲醇、乙腈和二甲基亚砜。其结构中的氯原子和氰甲基赋予该分子较高的反应活性, 是构建杂环化合物的重要中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡唑类化合物的关键衍生物, 该分子在药物化学中具有特殊价值。吡唑环作为生物电子等排体, 可模拟多种生物活性分子的药效团结构。氯原子的引入增强了分子的脂溶性, 而氰基则提供了进一步结构修饰的位点, 使其在激酶抑制剂和抗代谢类药物的研发中具有广泛应用前景。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域:

- 3.1 医药研发: 用于合成抗肿瘤、抗炎及抗感染药物的核心骨架
- 3.2 农药化学: 作为新型杀虫剂和杀菌剂的前体化合物
- 3.3 材料科学: 制备功能化离子液体和液晶材料的中间体
- 3.4 学术研究: 有机合成方法学开发中的模型底物

4. 储存条件与使用建议

建议在 $2-8^{\circ}C$ 惰性气体 (如氩气) 保护下避光保存, 长期储存需置于干燥器中。开封后建议一次性使用完毕, 若需分次使用, 应严格隔绝空气和湿气。实验操作应在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤和眼睛。溶解时建议优先选用无水级溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 重金属含量 $< 10ppm$ 。根据 GHS 分类, 具有以下危险特性: H302 (吞咽有害)、H315 (造成皮肤刺激)、H319 (造成严重眼刺激)。操

作时应佩戴化学防护手套、护目镜和实验服，如发生接触，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。

（注：本产品仅供科研用途，不适用于医药、食品及家庭用途）