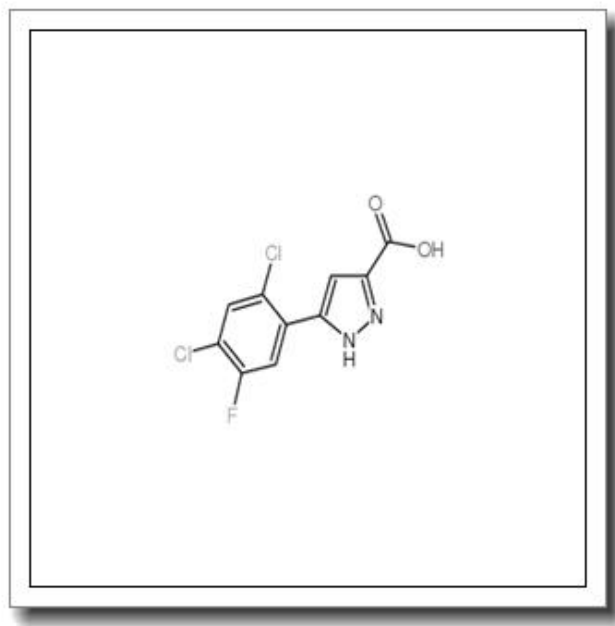


5-(2,4-二氯-5-氟苯基)-1H-吡唑-3-羧酸

3-(2,4-dichloro-5-fluorophenyl)-1H-pyrazole-5-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-(2,4-dichloro-5-fluorophenyl)-1H-pyrazole-5-carboxylic acid
中文名称	5-(2,4-二氯-5-氟苯基)-1H-吡唑-3-羧酸
CAS 号	1119299-75-0
分子式	C ₁₀ H ₅ Cl ₂ FN ₂ O ₂
分子量	275.063
纯度	≥ 96%

产品说明

3-(2,4-二氯-5-氟苯基)-1H-吡唑-3-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 3-(2,4-dichloro-5-fluorophenyl)-1H-pyrazole-5-carboxylic acid，分子式 C₁₀H₅Cl₂FN₂O₂，分子量 275.063，CAS 登记号 1119299-75-0。其结构中含二氯取代苯环、氟原子及吡唑羧酸基团，赋予其独特的电子效应和空间位阻特性。纯度 ≥96% (HPLC)，易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 等极性有机溶剂，微溶于水 (25℃时溶解度 <0.1 mg/mL)。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为吡唑羧酸类衍生物，可通过羧基与靶蛋白形成氢键或金属配位作用，其苯环上的卤素取代基能增强疏水相互作用。在药物化学中常作为关键中间体，用于构建激酶抑制剂或抗菌剂的活性核心结构，尤其在对氟代芳环有特异性需求的靶点设计中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域：一是作为 EGFR/HER2 抑制剂类抗癌药物的合成前体；二是在农用化学品中用于开发新型杀菌剂；三是在生化研究中作为荧光探针修饰基团。具体使用需结合反应条件优化，建议先进行小试以确定最佳投料比 (通常摩尔当量范围为 1.0-1.2)。

4. 储存条件与使用建议

长期储存需置于 -20℃、避光、干燥的惰性气体环境中，短期使用可存放于 4℃ 干燥器。开封后建议充氮密封保存，避免反复冻融。实验操作应在通风橱中进行，佩戴防尘口罩及丁腈手套。溶解时优先选用 DMSO，配制工作液后建议 24 小时内使用完毕。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 及质谱三重验证，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据表明其急性毒性 (LD₅₀ 大鼠口服) >500 mg/kg，但仍有刺激性，接触眼睛或皮肤时需

立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物处理应遵守当地危险化学品管理条例，不可直接排入下水系统。

（注：实际应用前请务必查阅最新版物质安全数据表 MSDS 并开展风险评估）