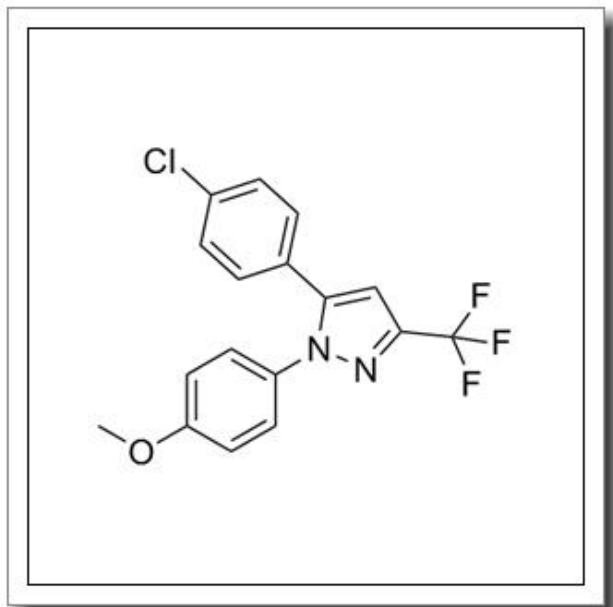


5-(4-氯苯基)-1-(4-甲氧基苯基)-3-(三氟甲基)-1H-吡唑

5-(4-chlorophenyl)-1-(4-methoxyphenyl)-3-(trifluoromethyl)pyrazole



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|--|
| 化学名称 | 5-(4-chlorophenyl)-1-(4-methoxyphenyl)-3-(trifluoromethyl)pyrazole |
| 中文名称 | 5-(4-氯苯基)-1-(4-甲氧基苯基)-3-(三氟甲基)-1H-吡唑 |
| CAS 号 | 188817-13-2 |
| 分子式 | C ₁₇ H ₁₂ ClF ₃ N ₂ O |
| 分子量 | 352.738 |
| 纯度 | ≥96% |

产品说明

5-(4-氯苯基)-1-(4-甲氧基苯基)-3-(三氟甲基)-1H-吡唑产品说明书

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 5-(4-chlorophenyl)-1-(4-methoxyphenyl)-3-(trifluoromethyl)pyrazole，分子式 $C_{17}H_{12}ClF_3N_2O$ ，分子量 352.738，CAS 登记号 188817-13-2。其结构中含氯苯基、甲氧苯基及三氟甲基吡唑环，赋予其独特的疏水性和电子效应。纯度 $\geq 96\%$ (HPLC)，熔点为 128-132°C，易溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为吡唑类衍生物，可通过抑制特定酶活性（如 COX-2）或干扰信号通路发挥生物效应。三氟甲基的强吸电子特性增强了其与靶标蛋白的结合能力，而甲氧基修饰可调节脂溶性，使其在药物设计中具有重要价值。其结构特征常用于先导化合物优化，尤其在抗炎、抗肿瘤领域的研究中备受关注。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发中，本品是合成非甾体抗炎药 (NSAIDs) 及激酶抑制剂的关键中间体。农业化学领域可用于开发新型杀虫剂或杀菌剂。此外，在材料科学中可作为有机发光二极管 (OLED) 的掺杂材料组分。实验室常用作标准品或对照品，用于分析方法开发与验证。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20°C 至 4°C 干燥环境中，避免光照与潮湿。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时需在通风橱中操作，佩戴防护手套及护目镜。溶解推荐使用分析级 DMSO，配制溶液建议现配现用，长期储存需分装冻存。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 及质谱严格质检，符合国际化学品标准。安全数据表明，其急性毒性 (LD50) 为大鼠经口 >500 mg/kg，对皮肤有轻度刺激性。操作时应避免吸入

粉尘或接触黏膜，废弃物需按危险化学品规范处置。紧急处理措施包括：眼部接触时用大量清水冲洗 15 分钟，皮肤沾染后立即用肥皂水清洗。

注：以上信息基于现有研究数据，具体应用需进一步实验验证。