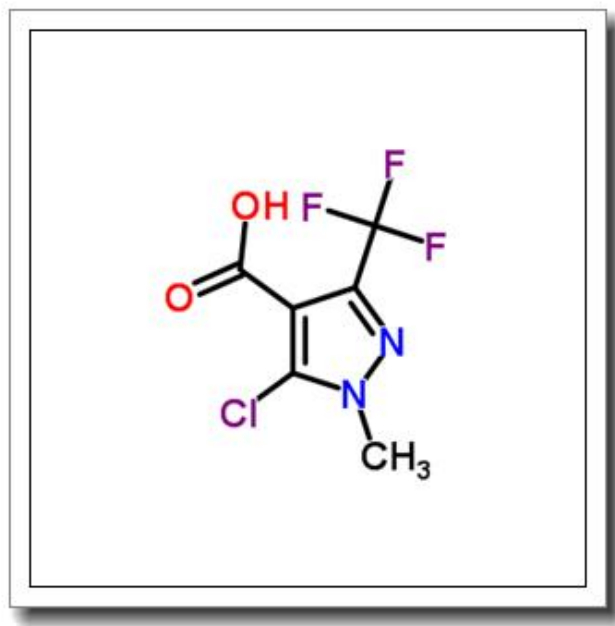


5-氯-1-甲基-3-(三氟甲基)吡咯-4-羧酸

5-Chloro-1-methyl-3-(trifluoromethyl)-1H-pyrazole-4-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-Chloro-1-methyl-3-(trifluoromethyl)-1H-pyrazole-4-carboxylic acid
中文名称	5-氯-1-甲基-3-(三氟甲基)吡咯-4-羧酸
CAS 号	128455-63-0
分子式	C ₆ H ₄ ClF ₃ N ₂ O ₂
分子量	228.556
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

5-氯-1-甲基-3-(三氟甲基)吡咯-4-羧酸 (CAS 号: 128455-63-0) 是一种含氟杂环羧酸化合物, 分子式为 $C_6H_4ClF_3N_2O_2$, 分子量为 228.556。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有稳定的化学性质。其结构中的三氟甲基和氯原子赋予其独特的电子效应和疏水性, 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

该化合物作为吡唑羧酸衍生物, 可通过羧基参与酯化、酰胺化等反应, 同时吡唑环上的氯原子和三氟甲基可进一步修饰, 形成多种活性中间体。其在生物化学领域常作为农药和医药中间体, 用于合成具有杀虫、杀菌或抗炎活性的靶向分子。

3. 主要应用领域与具体用途

5-氯-1-甲基-3-(三氟甲基)吡咯-4-羧酸广泛应用于农药和医药研发领域。在农药中, 它是合成新型吡唑类杀虫剂 (如氟虫腈衍生物) 的关键中间体; 在医药领域, 可用于构建含氟杂环药物骨架, 如抗炎、抗肿瘤化合物的合成。此外, 也可作为有机合成中的多功能砌块, 用于材料科学和精细化工研究。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品密封保存于干燥、阴凉处, 避免光照和潮湿环境, 储存温度以 $2-8^{\circ}C$ 为宜。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明, 该化合物易溶于极性有机溶剂 (如甲醇、乙腈), 难溶于水, 建议根据实验需求选择合适的溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度 $\geq 96\%$, 并提供 COA (质量分析证书)。安全信息方面, 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性, 操作时需佩戴防护手套、护目镜和防尘口罩。若不慎接触, 应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理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置。