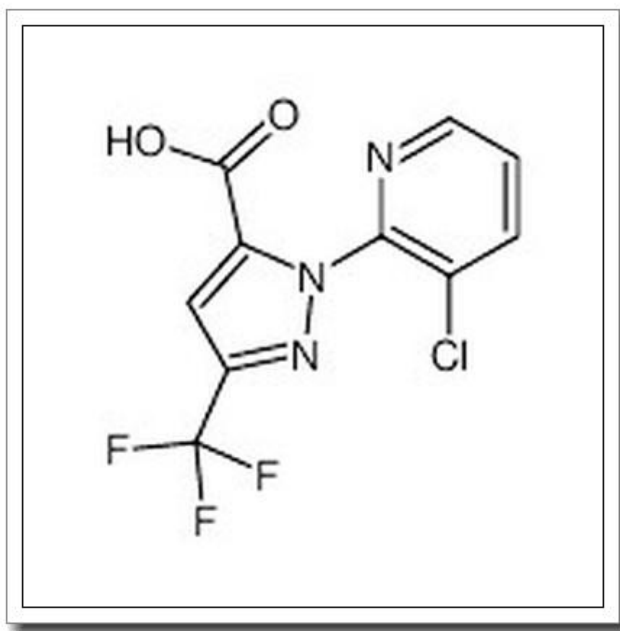


# 1-(3-氯吡啶-2-基)-3-(三氟甲基)-1H-吡唑-5-羧酸

*2-(3-chloropyridin-2-yl)-5-(trifluoromethyl)pyrazole-3-carboxylic acid*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(3-chloropyridin-2-yl)-5-(trifluoromethyl)pyrazole-3-carboxylic acid
中文名称	1-(3-氯吡啶-2-基)-3-(三氟甲基)-1H-吡唑-5-羧酸
CAS 号	438450-39-6
分子式	C <sub>10</sub> H <sub>5</sub> ClF <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>
分子量	291.614
纯度	>96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

1-(3-氯吡啶-2-基)-3-(三氟甲基)-1H-吡啶-5-羧酸 (CAS 号: 438450-39-6) 是一种含氯吡啶和三氟甲基取代的吡啶羧酸类化合物, 分子式为  $C_{10}H_5ClF_3N_3O_2$ , 分子量为 291.614。该化合物具有高纯度 (>96%), 结构中的氯原子和三氟甲基赋予其显著的电子效应和疏水性, 使其在有机合成和药物化学中具有独特价值。其固态通常为白色至类白色结晶粉末, 需避光保存以维持稳定性。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为杂环羧酸衍生物, 可通过羧基参与酯化、酰胺化等反应, 是合成农药和医药中间体的关键骨架。三氟甲基的强吸电子特性可增强分子与靶标蛋白的结合能力, 因此在设计酶抑制剂或受体调节剂时具有重要作用。其吡啶环结构常见于杀虫剂 (如新烟碱类) 和抗炎药物中, 体现了广泛的生物活性潜力。

### 3. 主要应用领域与具体用途

- 农药研发: 作为高效杀虫剂 (如氟啶虫酰胺) 的前体, 作用于昆虫神经系统。
- 医药中间体: 用于构建含三氟甲基的活性分子, 可能应用于抗肿瘤或抗感染药物开发。
- 材料科学: 作为配体或功能单体, 参与金属有机框架 (MOFs) 或高分子材料的合成。

### 4. 储存条件与使用建议

建议在  $-20^{\circ}C$ 、干燥避光条件下密封保存, 长期存放需充惰性气体保护。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砷 (DMSO)、甲醇等有机溶剂, 水溶性较低, 配制溶液时需选择合适的助溶剂。

### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 >96%, 并提供核磁 (NMR) 和质谱 (MS) 数据以确证结构。安全提示: 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统有刺激性, 操作时需佩戴防

护手套、护目镜及防尘口罩。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地环保法规，禁止直接排入环境。

(全文共 436 字)