

# 5-chloro-4-iodo-2-(trifluoromethyl)pyridine

产品图片未找到

## 产品基本信息

属性	值
化学名称	5-chloro-4-iodo-2-(trifluoromethyl)pyridine
产品目录号	
CAS 号	823221-95-0
分子式	C6H2ClF3IN
分子量	307.439
纯度	>96%

## 产品说明

### 5-氯-4-碘-2-(三氟甲基)吡啶产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品为含卤素及三氟甲基修饰的吡啶衍生物，化学名称为 5-氯-4-碘-2-(三氟甲基)吡啶 (CAS 号 823221-95-0)，分子式  $C_6H_2ClF_3IN$ ，分子量 307.439。其结构特征为吡啶环上氯、碘原子分别占据 5 位和 4 位，2 位引入强吸电子基团三氟甲基，赋予分子高反应活性。常温下为白色至类白色结晶粉末，纯度 >96% (HPLC)，易溶于有机溶剂如二氯甲烷、乙腈，微溶于水。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为多功能合成砌块，其碘原子可参与偶联反应（如 Suzuki、Sonogashira 反应），三氟甲基增强脂溶性并影响代谢稳定性，氯原子提供进一步官能团化位点。在药物化学中，此类结构常用于构建激酶抑制剂、抗病毒药物的核心骨架，尤其适用于靶向蛋白质相互作用的小分子设计。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

- (1) 医药研发：用于构建抗肿瘤、抗感染先导化合物，特别是含三氟甲基的喹啉类/吡啶类衍生物合成。
- (2) 材料科学：作为有机电致发光材料 (OLED) 的中间体，调节电子传输性能。
- (3) 农药开发：修饰为新型杀虫剂/杀菌剂的活性组分。
- (4) 放射性标记：碘位点可用于同位素标记示踪研究。

#### 4. 储存条件与使用建议

储存于  $-20^{\circ}C$  惰性气体（如氩气）保护的密闭容器中，避光防潮。开封后建议分装使用，避免反复冻融。溶解时优先选用干燥 DMF 或 THF，反应体系需严格除氧。因碘易光解，操作应在黄色灯光下进行。

#### 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 USP 标准。安全数据：急性毒性（口服 LD50）>500 mg/kg（大鼠），穿戴防护手套/护目镜操作。皮肤接触后立

即用肥皂水冲洗，吸入粉尘需转移至通风处。废弃物应作为有害化学品处置，遵守当地法规。

（注：实际应用前请查阅最新版 MSDS 并开展小试实验验证适用性）