

2-bromo-5-(trifluoromethyl)pyridine-4-carboxylic acid

2-bromo-5-(trifluoromethyl)pyridine-4-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-bromo-5-(trifluoromethyl)pyridine-4-carboxylic acid
中文名称	2-bromo-5-(trifluoromethyl)pyridine-4-carboxylic acid
CAS 号	823222-03-3
分子式	C7H3BrF3NO2
分子量	270.003
纯度	>96%

产品说明

2-溴-5-(三氟甲基)吡啶-4-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-溴-5-(三氟甲基)吡啶-4-羧酸 (CAS 号: 823222-03-3) 是一种含溴和氟的吡啶羧酸衍生物, 分子式为 $C_7H_3BrF_3NO_2$, 分子量为 270.003。该化合物为白色至类白色结晶粉末, 纯度 >96%, 具有显著的电子效应和空间位阻特性。其结构中的溴原子和三氟甲基基团赋予其高反应活性, 可作为有机合成中的关键中间体。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在药物化学和材料科学领域具有重要价值。吡啶环的刚性结构和强吸电子特性使其能够参与多种偶联反应 (如 Suzuki 偶联), 同时羧酸基团可进一步衍生化为酯、酰胺等官能团。三氟甲基的引入显著增强化合物的脂溶性和代谢稳定性, 使其成为设计靶向药物 (如激酶抑制剂) 的理想片段。

3. 主要应用领域与具体用途

作为医药中间体, 广泛用于抗肿瘤、抗病毒药物的研发, 例如用于合成 EGFR 抑制剂或抗 HIV 先导化合物。在农药领域, 可用于开发高效杀虫剂和除草剂。此外, 在功能材料领域, 可作为配体参与金属有机框架 (MOF) 材料的构建, 或用于液晶材料的改性。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、避光、干燥惰性气体环境下长期储存。短期使用可存放于 $2-8^{\circ}C$ 密封容器中。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, 该化合物易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、甲醇等极性有机溶剂, 水溶性较低 ($<0.1\text{ mg/mL}$)。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度 >96%, 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。MS 和 NMR 谱图确保结构准确性。安全数据: GHS 分类为刺激性 (Category 2), 操作时需佩戴防护眼镜、防

化手套。若不慎接触眼睛，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地危险化学品管理规定。

（注：本产品仅供科研用途，不适用于临床或食品领域）