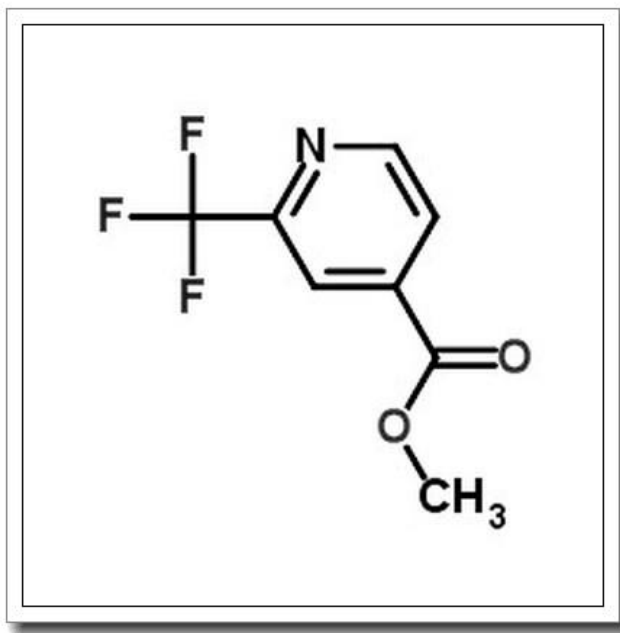


## 2-三氟甲基异烟酸甲酯

*Methyl 2-(trifluoromethyl)isonicotinate*



### 产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 2-(trifluoromethyl)isonicotinate
中文名称	2-三氟甲基异烟酸甲酯
CAS 号	588702-68-5
分子式	C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> F <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	205.134
纯度	>96%

## 产品说明

### 2-三氟甲基异烟酸甲酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

2-三氟甲基异烟酸甲酯 (Methyl 2-(trifluoromethyl)isonicotinate, CAS 588702-68-5) 是一种含氟杂环化合物, 分子式为  $C_8H_6F_3N_2O_2$ , 分子量 205.134。该化合物为无色至淡黄色液体或低熔点固体, 具有显著的脂溶性和化学稳定性, 其结构中三氟甲基 ( $-CF_3$ ) 与酯基的协同效应使其成为有机合成中的重要中间体。纯度标准 >96%, 可通过 HPLC 和 NMR 验证。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为含氟吡啶衍生物, 该化合物在生物活性分子设计中具有独特价值。三氟甲基的强吸电子特性可调节分子极性, 增强代谢稳定性, 常用于药物先导化合物的结构修饰。其在酶抑制、受体结合等研究中表现出潜在活性, 尤其在抗肿瘤和抗感染药物研发领域备受关注。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于以下领域:

- 3.1 医药研发: 作为关键中间体用于合成含氟喹诺酮类抗生素、激酶抑制剂等靶向药物。
- 3.2 农药化学: 参与构建高效低毒杀虫剂和除草剂的吡啶环骨架。
- 3.3 材料科学: 用于制备含氟液晶材料或光电功能分子的前体。
- 3.4 学术研究: 在有机氟化学机理探索和新型催化剂开发中作为模型化合物。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在  $-20^{\circ}C$  至  $4^{\circ}C$  的惰性气体 (如氩气) 环境下避光保存, 容器需密封防潮。开封后建议分装使用, 避免反复冻融。实验操作应在通风橱中进行, 佩戴防化手套和护目镜。溶解性测试显示易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 水溶性低 ( $<0.1$  mg/mL)。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品经 GC-MS 和元素分析双重验证，杂质含量控制在 4%以下（主要为同系物残留）。安全数据表明其对皮肤有轻度刺激性（GHS 分类：Skin Irrit. 2），操作后需彻底清洗接触部位。废弃物应作为有害化学品处理，避免直接排放。详细毒理学数据参见随附的 MSDS 报告。

注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件优化。批量采购可提供定制化纯度方案及技术支持。