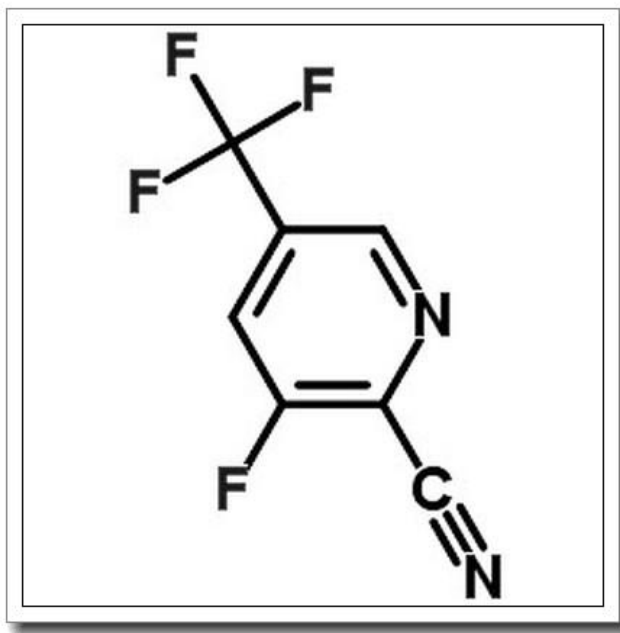


2-氰基-3-氟-5-三氟甲基吡啶

3-fluoro-5-(trifluoromethyl)pyridine-2-carbonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-fluoro-5-(trifluoromethyl)pyridine-2-carbonitrile
中文名称	2-氰基-3-氟-5-三氟甲基吡啶
CAS 号	80194-71-4
分子式	C ₇ H ₂ F ₄ N ₂
分子量	190.098
纯度	>96%

产品说明

2-氰基-3-氟-5-三氟甲基吡啶产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为含氟吡啶类化合物，化学名称为 3-fluoro-5-(trifluoromethyl)pyridine-2-carbonitrile，CAS 号为 80194-71-4。其分子式为 C₇H₂F₄N₂，分子量 190.098，常温下呈白色至类白色结晶粉末，纯度 ≥96%。该化合物结构中的氰基、氟原子及三氟甲基赋予其高电子亲和性与空间位阻效应，使其在极性有机溶剂（如乙腈、DMF）中具有良好溶解性，而在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡啶衍生物，其氟原子与三氟甲基的强吸电子特性可显著调节分子亲脂性与代谢稳定性，在药物化学中常用于先导化合物结构修饰。氰基的引入进一步增强了其与生物靶标（如酶活性位点）的相互作用能力，使其成为构建抗肿瘤、抗感染药物及农药活性分子的关键中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药和农用化学品研发领域。在医药领域，常用于合成激酶抑制剂、抗病毒药物（如 HCV 蛋白酶抑制剂）的骨架结构。在农药领域，可作为新型杀虫剂（如新烟碱类类似物）的合成前体。此外，在材料科学中可用于制备含氟液晶或电子传输材料。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20℃ 至 4℃ 的干燥环境中，避免光照与湿气。开封后需充惰性气体（如氮气）保护以延长稳定性。使用时应佩戴防护手套、护目镜及防毒面具，于通风橱中操作。溶解推荐使用无水 DMF 或 THF，避免与强氧化剂接触。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%，批次间一致性通过 ¹H NMR 和 LC-MS 验证。安全数据表明其急性毒性（LD₅₀ 大鼠口服）为 500-1000 mg/kg，属于有害物质

(H302)。如接触皮肤，需立即用大量清水冲洗 15 分钟；若吸入粉尘，应转移至空气新鲜处。废弃物处理需符合当地危险化学品法规。

注：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合用户实验条件优化。更多技术参数可索取 COA 报告。