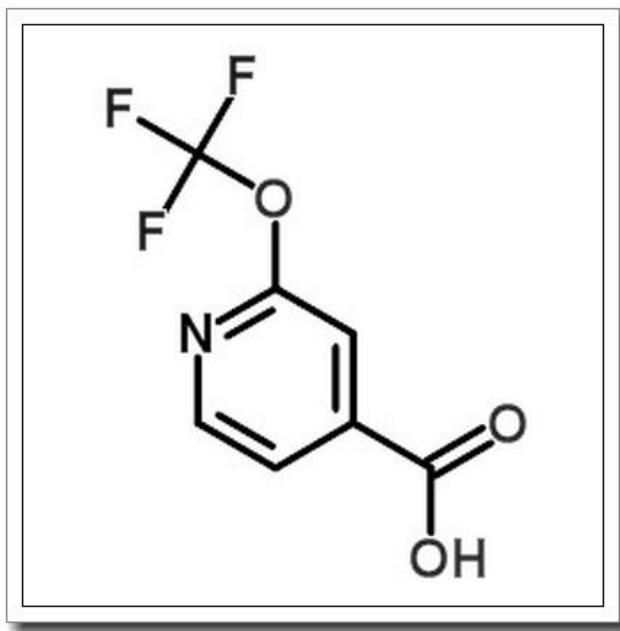


2(trifluoromethoxy)isonicotinic acid

2(trifluoromethoxy)isonicotinic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	2(trifluoromethoxy)isonicotinic acid
中文名称	2(trifluoromethoxy)isonicotinic acid
CAS 号	1221171-98-7
分子式	C ₇ H ₄ F ₃ N ₃ O ₃
分子量	207.107
纯度	>96%

产品说明

产品说明

1. 产品概述与化学特性

2(三氟甲氧基)异烟酸 (2(trifluoromethoxy)isonicotinic acid) 是一种含氟杂环羧酸化合物, 化学式为 $C_7H_4F_3NO_3$, 分子量为 207.107。其 CAS 号为 1221171-98-7, 纯度通常高于 96%。该化合物结构特征为异烟酸骨架的 2 位引入三氟甲氧基团, 赋予其独特的电子效应和疏水性, 使其在有机合成和药物化学中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

2(三氟甲氧基)异烟酸可作为医药中间体或生物活性分子的结构单元。三氟甲氧基的强吸电子特性可能影响化合物的代谢稳定性和靶标结合能力, 因此在药物设计中常用于优化先导化合物的药代动力学性质。此外, 其羧酸基团提供了进一步衍生化的可能性, 例如形成酰胺或酯类衍生物。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于以下领域:

- 医药研发: 作为构建块用于合成抗感染、抗炎或中枢神经系统药物。
- 农药化学: 含氟杂环结构在新型杀虫剂或除草剂开发中有潜在应用。
- 材料科学: 可作为含氟功能材料的单体或改性剂。

具体用途包括但不限于激酶抑制剂、G 蛋白偶联受体调节剂等小分子药物的合成中间体。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光密封保存, 长期储存需充惰性气体保护。使用时需在干燥环境中操作, 避免与强氧化剂接触。溶解性测试表明其可溶于二甲基亚砜 (DMSO)、甲醇等有机溶剂, 水溶性较低, 建议先以少量有机溶剂助溶后再进一步稀释。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确认纯度 $>96\%$, 批号相关 COA 可提供详细分析数据。安全注

意事项:

- 穿戴防护装备（手套、护目镜）操作
- 避免吸入粉尘或接触皮肤
- 应急处理：如接触眼睛，立即用大量清水冲洗并就医
- 废弃物应按照国家危险化学品规范处置

本产品仅供科研用途，不适用于诊断或治疗用途。使用者应具备有机化学实验操作经验，并在通风良好的环境下进行相关实验。