

2-羟基-5-碘-3-三氟甲基吡啶

5-Iodo-3-(Trifluoromethyl)-2(1H)-Pyridinone



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-Iodo-3-(Trifluoromethyl)-2(1H)-Pyridinone
中文名称	2-羟基-5-碘-3-三氟甲基吡啶
CAS 号	887707-23-5
分子式	C ₆ H ₃ F ₃ INO
分子量	288.994
纯度	>96%

产品说明

5-碘-3-三氟甲基-2(1H)-吡啶酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 5-Iodo-3-(Trifluoromethyl)-2(1H)-Pyridinone, 中文名为 2-羟基-5-碘-3-三氟甲基吡啶, CAS 号为 887707-23-5。分子式为 $C_6H_3F_3INO$, 分子量为 288.994, 纯度大于 96%。该化合物为白色至类白色结晶粉末, 具有吡啶酮母核结构, 碘原子和强吸电子三氟甲基的引入使其具有独特的化学反应活性, 适用于亲核取代、偶联反应等有机合成场景。

2. 生物化学功能与重要性

作为含卤素和氟原子的杂环化合物, 本品在药物化学中常用于构建活性分子骨架。碘原子的存在使其成为 Suzuki-Miyaura 偶联等交叉偶联反应的关键中间体, 而三氟甲基的强电负性可显著调节化合物的脂溶性和代谢稳定性。其在激酶抑制剂、抗病毒药物及农用化学品先导物开发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于医药研发和精细化工领域。具体用途包括: 作为抗肿瘤药物 (如 EGFR 抑制剂) 的合成中间体; 用于构建含三氟甲基的杂环化合物库; 在放射性标记前体化合物制备中发挥碘原子的示踪作用。此外, 在材料科学中可用于制备功能性液晶分子或光电材料单体。

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。开封后需充氮保护, 避免吸湿和氧化。使用时应在通风橱中操作, 建议以 DMSO 或 DMF 为溶剂配制母液, 现配现用。与强氧化剂、强酸强碱需隔离存放。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 水分含量 $\leq 0.5\%$, 残留溶剂符合 ICH 标准。本品属于刺激性化学品, 操作时需佩戴护目镜、防毒口罩及丁腈手套。皮肤接触后应立即用大

量清水冲洗，眼睛接触需用生理盐水冲洗并就医。废弃物应作为有害化学废料处理，遵守当地环保法规。

（注：本说明基于当前研究数据，实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。）