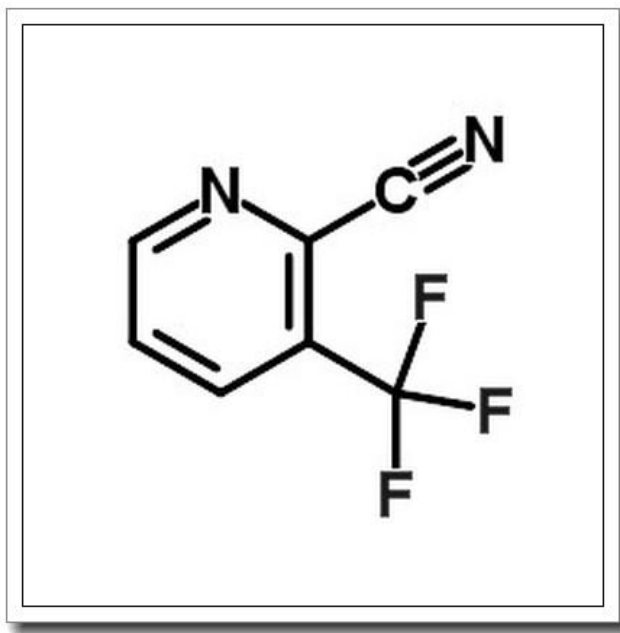


3-三氟甲基-2-吡啶腈

2-Cyano-3-trifluoromethylpyridine



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Cyano-3-trifluoromethylpyridine
中文名称	3-三氟甲基-2-吡啶腈
CAS 号	406933-21-9
分子式	C ₇ H ₃ F ₃ N ₂
分子量	172.107
纯度	>96%

产品说明

2-氰基-3-三氟甲基吡啶产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-氰基-3-三氟甲基吡啶 (2-Cyano-3-trifluoromethylpyridine) 是一种含氟吡啶衍生物，化学式为 $C_7H_3F_3N_2$ ，分子量 172.107，CAS 号为 406933-21-9。该化合物为白色至类白色结晶粉末，纯度 >96%，具有显著的疏水性和电子效应。三氟甲基与氰基的协同作用使其成为高反应活性的中间体，适用于亲核取代、偶联反应等有机合成场景。其熔点和沸点数据需通过实验测定，建议在惰性气体保护下进行高温操作。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟杂环化合物，该分子在药物化学中具有特殊价值。三氟甲基的强吸电子特性可调节母核的电子云密度，增强代谢稳定性和生物膜穿透性；氰基则作为关键药效团，参与氢键形成或转化为其他官能团。此类结构常见于抗肿瘤、抗病毒及中枢神经系统药物的先导化合物设计中，例如用于激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂的开发。

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：作为含氟药物中间体，用于合成三取代吡啶类活性分子。
- 3.2 农药化学：构建具有杀虫或杀菌活性的含氟杂环结构。
- 3.3 材料科学：参与制备液晶材料或有机电致发光材料的功能单体。
- 3.4 学术研究：作为探针分子研究氟原子对芳香体系反应活性的影响。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，置于 -20°C 至 4°C 干燥避光环境，惰性气体保护可延长稳定性。开封后建议一次性使用完毕，若需分次使用，需在手套箱中操作。溶解时优先选用无水 DMF 或 THF 等非质子极性溶剂，避免与强氧化剂、强酸强碱共存。实验操作需在通风橱中进行，佩戴防化手套及护目镜。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，批次间偏差控制在 $\pm 1\%$ 以内。MS 和 NMR 谱图可提供验证。安全数据如下：

- 5.1 危害标识：刺激性（Xi），接触皮肤可能引起红肿。
- 5.2 急救措施：皮肤接触时立即用大量清水冲洗 15 分钟，眼睛接触需用生理盐水冲洗并就医。
- 5.3 废弃物处理：按危险化学品规范处置，不可直接排入下水道。

注：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合用户实际需求进行验证。