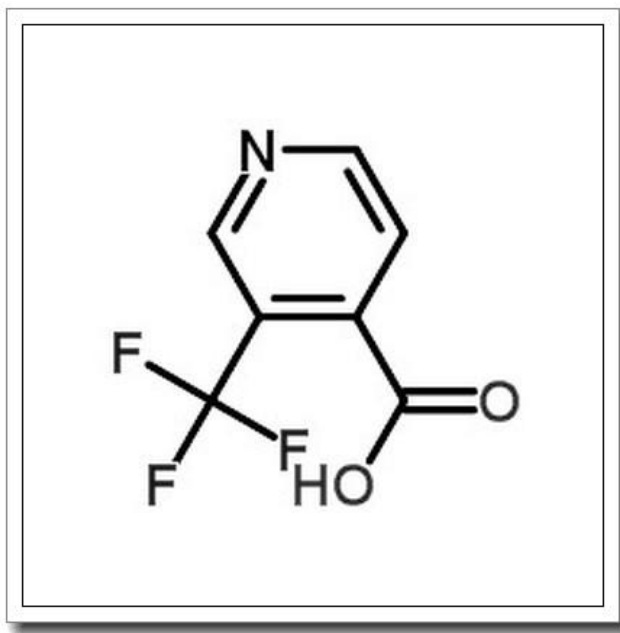


3-(三氟甲基)异烟酸

3-(Trifluoromethyl) Isonicotinic Acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-(Trifluoromethyl) Isonicotinic Acid
中文名称	3-(三氟甲基)异烟酸
CAS 号	590371-38-3
分子式	C ₇ H ₄ F ₃ N ₂ O ₂
分子量	191.107
纯度	>96%

产品说明

3-(三氟甲基)异烟酸产品说明

1. 产品概述与化学特性

3-(三氟甲基)异烟酸 (英文名称: 3-(Trifluoromethyl)Isonicotinic Acid) 是一种含氟杂环羧酸化合物, CAS 号为 590371-38-3, 分子式为 $C_7H_4F_3NO_2$, 分子量为 191.107。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在, 纯度通常高于 96%。其结构中的三氟甲基 ($-CF_3$) 和羧基 ($-COOH$) 赋予其独特的化学性质, 如较高的电子亲和力和稳定性, 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

3-(三氟甲基)异烟酸是一种重要的医药中间体, 其结构中的异烟酸骨架和三氟甲基基团使其在生物活性分子设计中具有广泛的应用潜力。三氟甲基的引入可显著改善化合物的脂溶性、代谢稳定性和生物利用度, 因此在药物研发中常用于优化先导化合物的药理性能。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于以下领域:

- 药物研发: 作为关键中间体用于合成抗结核、抗感染及抗肿瘤药物。
- 农药化学: 用于开发含氟农药, 提高农药的活性和环境稳定性。
- 材料科学: 作为含氟功能材料的合成前体, 应用于液晶材料或高分子改性。
- 学术研究: 在有机氟化学和杂环化合物研究中作为重要试剂。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于干燥、阴凉的环境中, 避免光照和潮湿。储存温度应控制在 2-8° C, 长期保存需密封于惰性气体 (如氮气) 保护下。使用时需佩戴防护手套和护目镜, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明, 该化合物易溶于极性有机溶剂 (如 DMF、DMSO), 微溶于水。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度 $\geq 96\%$, 并提供详细的质量分析报告 (COA)。安全信

息方面，该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性，操作时应在通风良好的环境下进行。若不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地环保法规，建议通过专业化学废弃物回收渠道处置。

以上信息仅供参考，具体应用需结合实验需求进一步验证。