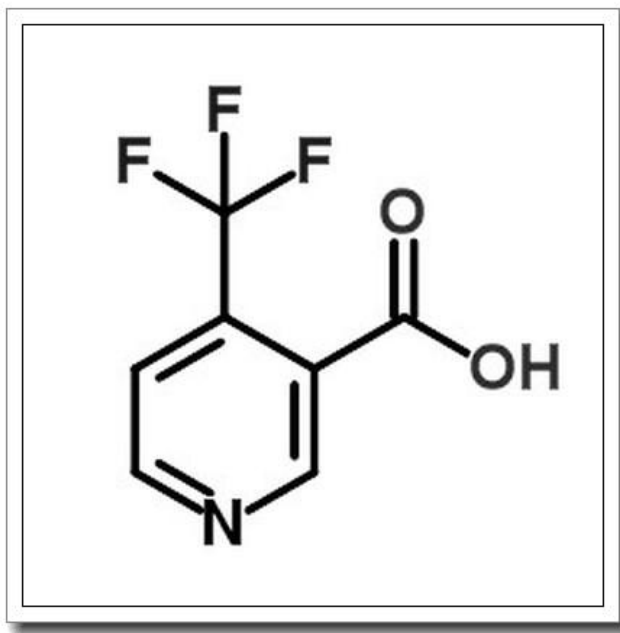


4-三氟甲基烟酸

4-(Trifluoromethyl)nicotinic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-(Trifluoromethyl)nicotinic acid
中文名称	4-三氟甲基烟酸
CAS 号	158063-66-2
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

1. 产品概述与化学特性

4-三氟甲基烟酸 (4-(Trifluoromethyl)nicotinic acid) 是一种含氟烟酸衍生物，化学式为 $C_7H_4F_3NO_2$ ，分子量为 191.107，CAS 号为 158063-66-2。该化合物为白色至类白色结晶性粉末，纯度 >96%，具有较高的化学稳定性和溶解性，可溶于有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO，微溶于水。其结构中三氟甲基的引入显著增强了分子的电子效应和疏水性，使其在药物化学和材料科学中具有独特价值。

2. 生物化学功能与重要性

4-三氟甲基烟酸作为烟酸的衍生物，保留了烟酸的基本药理活性框架，同时因三氟甲基的引入而表现出更高的代谢稳定性和生物利用度。其在生物体内可参与辅酶 NAD⁺/NADP⁺ 的合成途径，也可能作为酶抑制剂或受体配体的关键结构单元。此外，三氟甲基的强吸电子特性使其在药物设计中常用于调节分子的 pKa 值和脂溶性。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于医药研发和有机合成领域。在药物化学中，它是合成抗肿瘤、抗炎及中枢神经系统药物的重要中间体，尤其用于构建含三氟甲基的杂环化合物。在农药领域，可用于开发高效低毒的杀虫剂或除草剂。此外，在材料科学中，其衍生物可作为液晶材料或光电材料的功能性组分。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、阴凉处，避免光照和潮湿环境，长期储存温度应控制在 2-8°C。使用时需在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解时建议优先选择极性有机溶剂，并根据实验需求调整浓度。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测，纯度 >96%，并提供 COA (质量分析证书)。安全方面，该物质可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性，操作时需佩戴防护手套、护目镜和口罩。若不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。

(注: 实际使用前请查阅最新版 MSDS 并遵守实验室安全规程。)