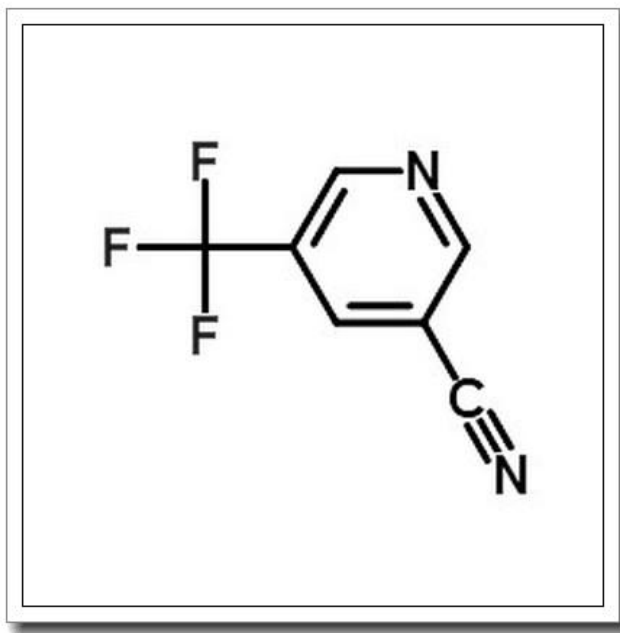


# 5-三氟甲基-3-嘧啶甲腈

*5-(Trifluoromethyl)nicotinonitrile*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	5-(Trifluoromethyl)nicotinonitrile
中文名称	5-三氟甲基-3-嘧啶甲腈
CAS 号	951624-83-2
分子式	C <sub>7</sub> H <sub>3</sub> F <sub>3</sub> N <sub>2</sub>
分子量	172.107
纯度	>96%

## 产品说明

### 5-(三氟甲基)烟腈产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

5-(三氟甲基)烟腈（化学名称：5-(Trifluoromethyl)nicotinonitrile, CAS 号：951624-83-2）是一种含氟杂环化合物，分子式为  $C_7H_3F_3N_2$ ，分子量 172.107。其结构以吡啶环为核心，3 位氰基与 5 位三氟甲基的协同修饰赋予其独特的电子效应与空间位阻。本品为白色至类白色结晶粉末，纯度 >96%，易溶于有机溶剂如二甲基亚砜（DMSO）和甲醇，在药物化学中常作为关键中间体使用。

#### 2. 生物化学功能与重要性

三氟甲基的强吸电子特性与氰基的偶极作用，使该化合物成为调节分子亲脂性（LogP）和膜穿透性的理想修饰基团。在酶抑制研究中，其结构可模拟天然底物的过渡态，尤其适用于靶向激酶和脱氢酶的抑制剂设计。此外，氟原子的引入能显著增强代谢稳定性，在先导化合物优化阶段具有重要价值。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药研发和材料科学领域：

- 医药中间体：用于合成抗肿瘤、抗病毒（如 HCV 蛋白酶抑制剂）及中枢神经系统药物
- 农药化学：作为杀菌剂和杀虫剂的活性组分前体
- 材料科学：参与构建含氟液晶材料与光电分子器件
- 科研工具：在 PET 示踪剂开发中作为氟标记前体

#### 4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，置于 -20℃ 干燥避光环境，惰性气体保护可延长稳定性。开封后建议分装使用，避免反复冻融。实验操作需在通风橱中进行，佩戴防化手套与护目镜。溶解时优先选用无水 DMF 或 THF，水相体系需控制 pH > 6 以防止氰基水解。

#### 5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC（UV 254nm）检测纯度，批次间 RSD < 1%。残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。

安全数据: 急性毒性 (口服大鼠 LD50) >500mg/kg, 皮肤刺激性类别 3。废弃物处理需遵守当地危化品法规, 建议采用碱催化分解法处置。

(注: 本说明基于现有研究数据, 实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。)