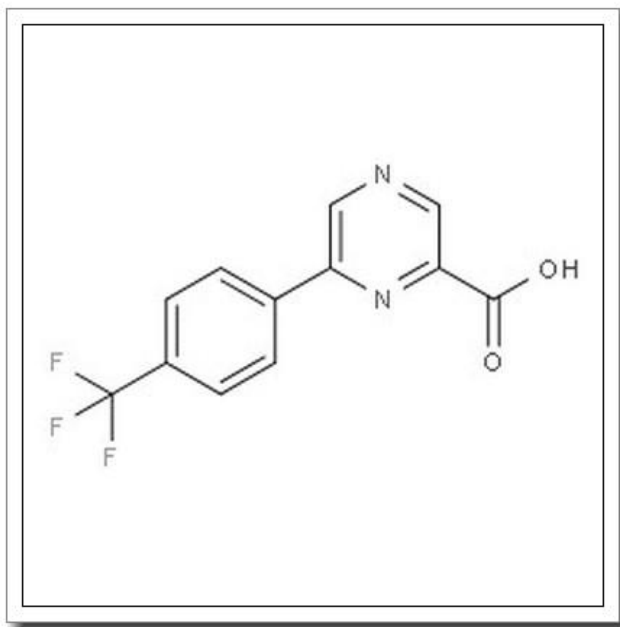


6-[4-(三氟甲基)苯基]吡嗪-2-甲酸

6-[4-(Trifluoromethyl)phenyl]pyrazine-2-carboxylic Acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	6-[4-(Trifluoromethyl)phenyl]pyrazine-2-carboxylic Acid
中文名称	6-[4-(三氟甲基)苯基]吡嗪-2-甲酸
CAS 号	1864014-28-7
分子式	C ₁₂ H ₇ F ₃ N ₂ O ₂
分子量	268.191
纯度	>96%

产品说明

6-[4-(三氟甲基)苯基]吡嗪-2-甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 6-[4-(三氟甲基)苯基]吡嗪-2-甲酸，CAS 号 1864014-28-7，分子式 C₁₂H₇F₃N₂O₂，分子量 268.191。其结构中含吡嗪环与三氟甲基苯基基团，赋予其独特的电子效应和疏水性。纯度经 HPLC 验证大于 96%，符合有机合成与医药研发的高标准需求。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为吡嗪羧酸衍生物，具有显著的生物活性潜力。三氟甲基的强吸电子特性可增强分子与靶蛋白的结合能力，使其在酶抑制或受体调节研究中具有重要价值。其羧酸基团进一步提供了衍生化位点，适用于构建更复杂的药物分子或生物探针。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药化学领域，本品常用于抗肿瘤或抗炎先导化合物的结构修饰。其可作为激酶抑制剂的核心骨架，或通过酯化、酰胺化反应制备前药。材料科学中，因其共轭结构，可能用于有机光电材料的合成。具体实验用途包括但不限于体外活性筛选、结构-活性关系（SAR）研究及分子对接模型的配体构建。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于-20℃干燥环境中，避免光照与湿气。开封后需充入惰性气体保护。使用时应在通风橱中操作，佩戴防护手套与护目镜。溶解性测试表明其易溶于 DMSO（约 50 mg/mL），甲醇中溶解度适中，水溶性较差，建议预配成高浓度储备液后稀释使用。

5. 质量控制与安全信息

批次质检报告包含 HPLC 纯度、核磁共振（¹H NMR）及质谱（MS）验证数据。该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性，安全操作需参照 MSDS（材料安全数据表）。废弃物处理应遵循有机卤化物处置规范，不可直接排入下水道。

注：本产品仅限科研用途，不适用于诊断或治疗。使用者应具备专业化学知识并遵守实验室安全规程。