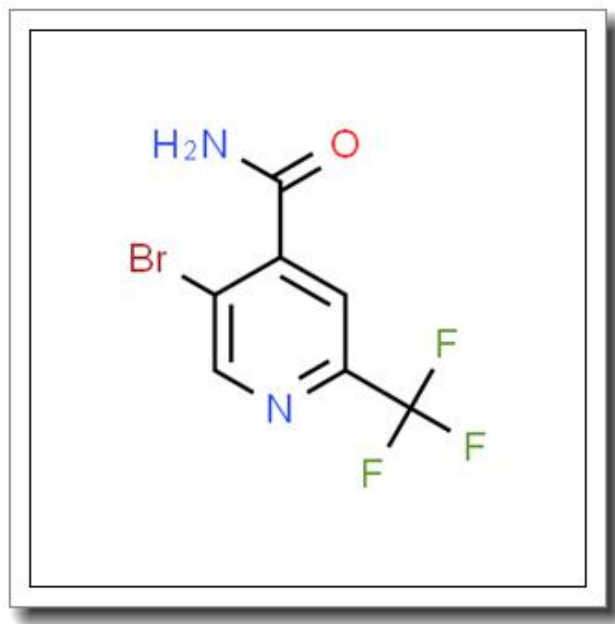


2-三氟甲基-5-溴异烟酰胺

5-bromo-2-trifluoromethyl-isonicotinamide



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-bromo-2-trifluoromethyl-isonicotinamide
中文名称	2-三氟甲基-5-溴异烟酰胺
CAS 号	1070892-03-3
分子式	C ₇ H ₄ BrF ₃ N ₂ O
分子量	269.02
纯度	≥96%

产品说明

5-溴-2-三氟甲基异烟酰胺产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-溴-2-三氟甲基异烟酰胺（化学名称：5-bromo-2-trifluoromethyl-isonicotinamide，CAS 号：1070892-03-3）是一种含溴和氟取代的吡啶甲酰胺衍生物，分子式为 $C_7H_4BrF_3N_2O$ ，分子量为 269.02。该化合物为白色至类白色结晶性粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，具有独特的电子效应和空间位阻特性，三氟甲基和溴原子的引入显著增强了其反应活性和生物活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为异烟酰胺类化合物的修饰衍生物，其分子中的溴原子可作为亲电反应位点参与偶联反应，而三氟甲基的强吸电子效应可调节分子脂溶性和代谢稳定性。该结构在药物化学中常用于构建酶抑制剂或受体拮抗剂的活性核心，尤其在抗肿瘤和抗感染药物研发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于医药中间体合成和生物活性分子开发领域。具体用途包括：

- 作为关键中间体用于合成含三氟甲基的靶向抗肿瘤化合物
- 在农药化学中用于构建高效杀虫剂或杀菌剂的活性骨架
- 作为荧光标记物或探针的前体，应用于分子影像学研究
- 在有机催化反应中作为配体或催化剂组分

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20°C 、干燥避光条件下长期储存，短期使用可存放于 $2-8^{\circ}\text{C}$ 环境。开封后需充惰性气体保护，避免吸湿分解。使用时应在通风橱中操作，推荐使用玻璃或聚四氟乙烯材质容器，避免与强氧化剂或强酸接触。溶解性测试表明其在 DMSO 和 DMF 中溶解度良好 ($>50\text{ mg/mL}$)，水溶性较低。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，批次间一致性误差 $< 2\%$ 。安全数据表明其属于刺激

性化学品，操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。如接触皮肤，应立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物处理需符合危险化学品处置规范，避免直接排放至自然环境。详细毒理学数据可参考随附的 MSDS（材料安全数据表）。

注：本产品仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。具体应用方案建议通过预实验优化反应条件。