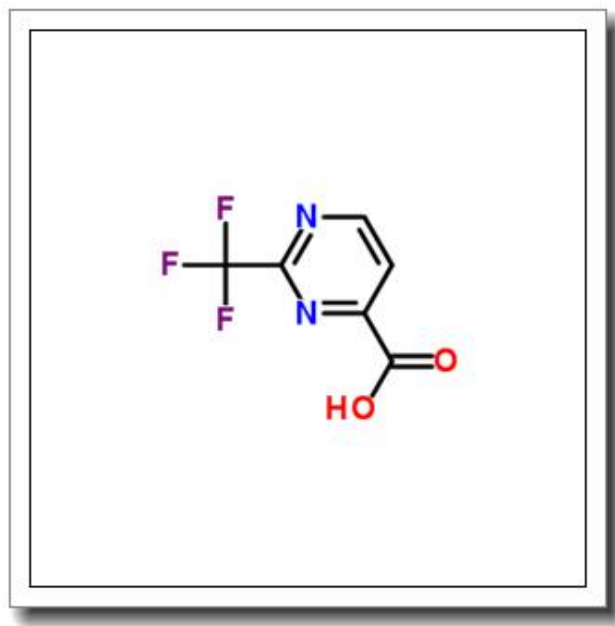


# 2-(三氟甲基)嘧啶-4-羧酸

*2-(Trifluoromethyl)pyrimidine-4-carboxylic acid*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(Trifluoromethyl)pyrimidine-4-carboxylic acid
中文名称	2-(三氟甲基)嘧啶-4-羧酸
CAS 号	878742-59-7
分子式	C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> F <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	192.095
纯度	≥96%

## 产品说明

### 2-(三氟甲基)嘧啶-4-羧酸产品说明

#### 1. 产品概述与化学特性

2-(三氟甲基)嘧啶-4-羧酸 (英文名称: 2-(Trifluoromethyl)pyrimidine-4-carboxylic acid) 是一种含氟嘧啶类有机化合物, CAS 号为 878742-59-7, 分子式为  $C_6H_3F_3N_2O_2$ , 分子量为 192.095。本品为白色至类白色结晶性粉末, 纯度  $\geq 96\%$ , 具有嘧啶环和羧酸基团的结构特征, 同时三氟甲基的引入赋予其独特的电子效应和疏水性, 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

该化合物作为嘧啶衍生物, 可通过羧酸基团参与酰胺化、酯化等反应, 或通过嘧啶环进行亲核取代、金属催化偶联等反应。三氟甲基的强吸电子特性可调节分子极性 & 代谢稳定性, 使其在药物设计中常用于优化先导化合物的生物活性和药代动力学性质。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药中间体、农药化学及材料科学领域。具体用途包括:

- 作为关键片段用于合成抗病毒、抗肿瘤药物 (如激酶抑制剂);
- 用于构建含氟杂环化合物, 提升农药活性分子的稳定性;
- 在有机光电材料中作为电子受体单元, 调节材料能级结构。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、避光环境中, 温度控制在  $2-8^{\circ}C$  以延长稳定性。使用时需在惰性气体 (如氮气) 保护下操作, 避免与强氧化剂接触。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜 (DMSO), 微溶于甲醇, 水溶性较差, 建议根据实验需求选择合适的溶剂体系。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ , MS 和 NMR 确证结构。安全信息如下:

- 可能对眼睛、皮肤及呼吸道有刺激性, 操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口

罩;

- 若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医；
- 废弃物处置需符合当地环保法规，避免直接排放。

本产品仅供科研用途，不适用于临床或食品领域。