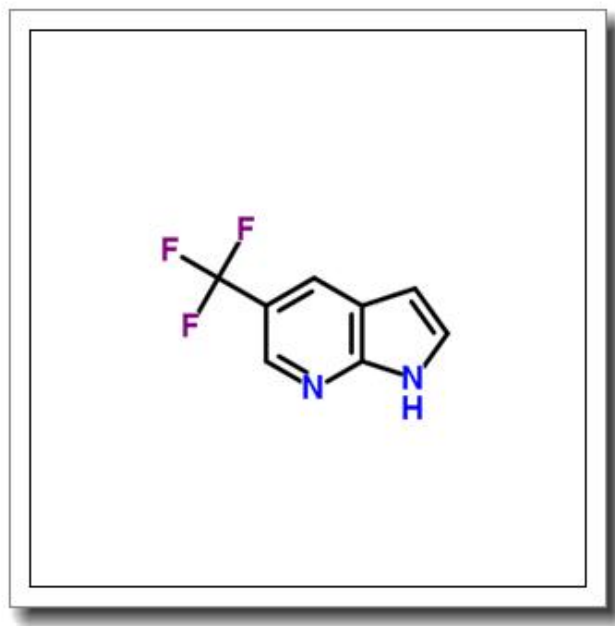


5-三氟甲基-7-N-杂吡啶

5-(trifluoromethyl)-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-(trifluoromethyl)-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine
中文名称	5-三氟甲基-7-N-杂吡啶
CAS 号	1036027-54-9
分子式	C ₈ H ₅ F ₃ N ₂
分子量	186.134
纯度	≥96%

产品说明

5-三氟甲基-7-N-杂吡啶产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-三氟甲基-7-N-杂吡啶（化学名称：5-(trifluoromethyl)-1H-pyrrolo[2,3-b]pyridine）是一种含氟杂环化合物，CAS 号为 1036027-54-9，分子式为 C₈H₅F₃N₂，分子量 186.134。其结构以吡咯并[2,3-b]吡啶为母核，5 位引入三氟甲基基团，赋予其独特的电子效应和疏水性。常温下为白色至类白色结晶粉末，纯度 ≥96%，易溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为杂吡啶衍生物，具有显著的生物活性骨架，三氟甲基的强吸电子特性可增强分子与靶标蛋白的相互作用。在药物化学中，其结构常作为激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂的核心片段，尤其在抗肿瘤和中枢神经系统药物研发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药研发：用于构建小分子药物库，针对 EGFR、ALK 等激酶靶点的先导化合物优化。
- 3.2 材料科学：作为含氟功能材料的前体，应用于液晶或光电材料合成。
- 3.3 农药化学：修饰为高效杀虫剂或杀菌剂的活性组分。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃、避光、干燥的惰性气体环境中，开封后需充氮密封保存。建议使用前进行氮气保护下溶解，避免反复冻融。操作时需佩戴防毒面具及丁腈手套，在通风橱中完成称量。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%，MS 和 NMR 验证结构。安全数据：急性毒性（口服 LD₅₀）>500 mg/kg（大鼠），对眼睛和皮肤有轻微刺激性。废弃物需按危险化学品处理，避免与强氧化剂接触。

注：以上信息基于实验室环境数据，实际应用需结合具体实验方案调整。