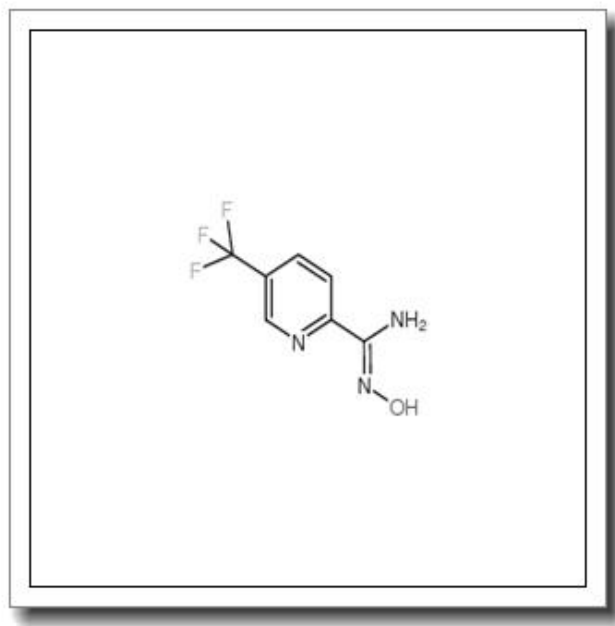


5-(三氟甲基)吡啶-2-甲脒肟

5-(trifluoromethyl)pyridine-2-carboxamide oxime



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-(trifluoromethyl)pyridine-2-carboxamide oxime
中文名称	5-(三氟甲基)吡啶-2-甲脒肟
CAS 号	175277-44-8
分子式	C7H6F3N3O
分子量	205.137
纯度	≥96%

产品说明

5-(三氟甲基)吡啶-2-甲脒脞产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-(三氟甲基)吡啶-2-甲脒脞 (CAS 号: 175277-44-8) 是一种含氟吡啶衍生物, 分子式为 $C_7H_6F_3N_3O$, 分子量 205.137。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在, 纯度 $\geq 96\%$, 具有显著的化学稳定性和反应活性。其结构中三氟甲基的强吸电子效应与吡啶环的共轭体系相结合, 使其在亲核取代和配位反应中表现出独特性质。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡啶类化合物的修饰衍生物, 该产品可通过脒基 ($-C=N-OH$) 参与金属螯合或氢键形成, 在酶抑制和分子探针设计中具有潜在价值。三氟甲基的引入增强了其脂溶性, 有利于跨膜传输, 在药物化学中常用于先导化合物的结构优化。其高电子密度区域可作为蛋白质结合位点的识别基团。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本品是合成抗病毒和抗肿瘤药物的重要中间体, 尤其用于构建含氟杂环骨架。农业化学中可用于新型杀虫剂或杀菌剂的开发。材料科学方面, 其可作为配体参与催化体系设计, 或用于功能化聚合物的改性。实验室中常用于有机氟化学机理研究及复杂分子构建。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 的干燥环境中, 避免光照和湿度波动。开封后需充惰性气体保护, 长期储存建议分装。使用时应佩戴防护手套和护目镜, 在通风橱中操作。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇, 水溶性较低 (< 1 mg/mL), 配制溶液时需超声辅助分散。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 批次间差异控制在 $\pm 1\%$ 以内。核磁共振 (1H NMR、 ^{19}F NMR) 和质谱 (LC-MS) 用于结构确证。安全数据表明其急性毒性 (LD50 大鼠

口服) >500 mg/kg, 但仍可能引起眼睛和皮肤刺激。意外接触时需立即用大量清水冲洗 15 分钟, 并就医观察。废弃物处理需符合当地危险化学品管理条例。

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