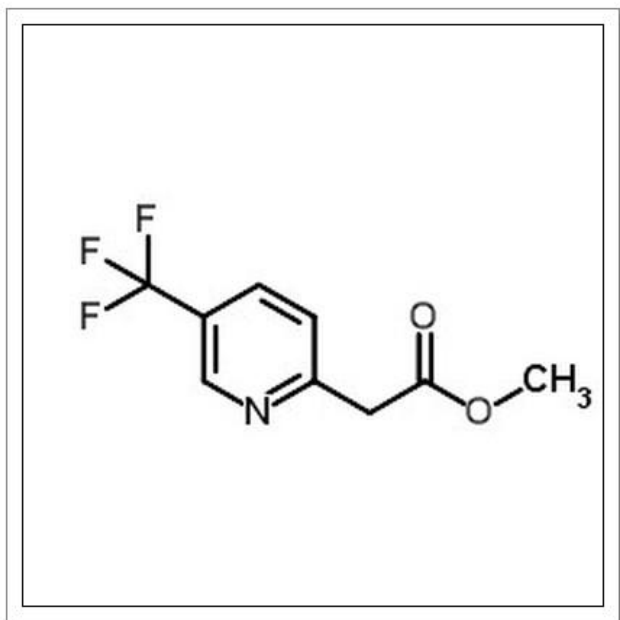


2-(5-(三氟甲基)吡啶-2-基)乙酸甲酯

Methyl [5-(trifluoromethyl)-2-pyridinyl]acetate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl [5-(trifluoromethyl)-2-pyridinyl]acetate
中文名称	2-(5-(三氟甲基)吡啶-2-基)乙酸甲酯
CAS 号	1810715-04-8
分子式	C ₉ H ₈ F ₃ N ₂ O ₂
分子量	219.161
纯度	>96%

产品说明

2-(5-(三氟甲基)吡啶-2-基)乙酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-(5-(三氟甲基)吡啶-2-基)乙酸甲酯 (Methyl [5-(trifluoromethyl)-2-pyridinyl]acetate) 是一种含氟吡啶衍生物，化学式为 $C_9H_8F_3NO_2$ ，分子量 219.161，CAS 号为 1810715-04-8。本品为无色至淡黄色液体或低熔点固体，纯度 $\geq 96\%$ ，具有典型酯类特征气味。其结构中三氟甲基的强吸电子效应与吡啶环的共轭体系赋予该化合物独特的化学稳定性与反应活性，易参与亲核取代、偶联反应等有机合成过程。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟杂环化合物，该分子在药物化学中具有重要价值。三氟甲基的引入可显著改善母体分子的脂溶性、代谢稳定性及生物膜穿透性，而吡啶环作为常见药效团，能通过氢键相互作用增强靶标结合能力。其酯基结构可作为羧酸前体，在体内经水解转化为活性形式，广泛应用于前药设计与生物活性分子修饰。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于以下领域：

- (1) 医药中间体：用于合成抗肿瘤、抗病毒及中枢神经系统药物，尤其是含三氟甲基的靶向药物开发；
- (2) 农药化学：作为杀菌剂或杀虫剂的吡啶类衍生物合成砌块；
- (3) 材料科学：用于制备含氟液晶材料或光电功能分子；
- (4) 科研试剂：在有机方法学研究中作为三氟甲基化反应的模型底物。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 惰性气体（如氩气）保护下避光保存，开封后需充氮密封。使用时应于干燥环境中操作，避免接触强氧化剂或酸碱物质。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂，水溶性较低，实验时建议先进行小剂量溶解性验证。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，批次间偏差控制在 $\pm 1\%$ 以内。安全数据表明其具有刺激性，操作时需佩戴防护手套、护目镜及防毒面具，避免吸入蒸气或皮肤直接接触。若发生泄漏，应立即用惰性吸附材料处理。废弃物应按照国家危险化学品规范处置，严禁直接排入下水道。详细毒理学数据请参阅随货提供的 MSDS 文件。

注：本说明基于现有研究数据编制，实际应用前请结合具体实验条件进行验证。