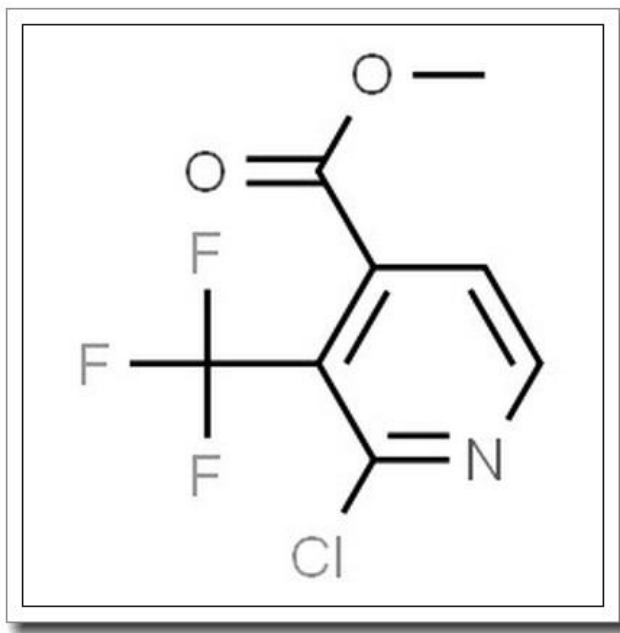


2-氯-3-(三氟甲基)异烟酸甲酯

Methyl 2-chloro-3-(trifluoromethyl)isonicotinate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 2-chloro-3-(trifluoromethyl)isonicotinate
中文名称	2-氯-3-(三氟甲基)异烟酸甲酯
CAS 号	1227575-06-5
分子式	C ₈ H ₅ ClF ₃ N ₂ O ₂
分子量	239.58
纯度	>96%

产品说明

2-氯-3-(三氟甲基)异烟酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-氯-3-(三氟甲基)异烟酸甲酯 (Methyl 2-chloro-3-(trifluoromethyl)isonicotinate) 是一种含氟杂环化合物，化学式为 $C_8H_5ClF_3N_2O_2$ ，分子量 239.58，CAS 号为 1227575-06-5。本品为白色至类白色结晶或粉末，纯度高于 96%，具有显著的化学稳定性和反应活性。其结构中的三氟甲基和氯原子赋予其独特的电子效应，使其成为有机合成和药物研发中的重要中间体。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为吡啶衍生物，可通过亲核取代、偶联反应等途径进一步修饰，广泛应用于含氟药物的合成。三氟甲基的强吸电子特性可显著改变分子极性及其生物活性，在农药和医药领域常用于优化先导化合物的代谢稳定性与靶标结合能力。此外，其异烟酸酯结构在构建杂环体系时具有关键作用。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发中，本品常用于合成抗肿瘤、抗病毒及中枢神经系统药物的活性片段。农药工业中，其作为含氟杀虫剂或除草剂的中间体，可增强产品的生物利用度。此外，在材料科学领域，可用于制备特殊功能的液晶材料或高分子单体。具体应用需结合实验设计，推荐用量为反应摩尔比的 1.05-1.2 倍以确保完全转化。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，避光、防潮，建议温度控制在 2-8°C 以延长保质期。使用前需恢复至室温并干燥处理。操作时应在通风橱中进行，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。建议佩戴化学防护手套、护目镜及防尘口罩。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，水分含量 $\leq 0.5\%$ ，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明，其急性毒性 (LD50) 为大鼠经口 > 500 mg/kg，但对眼睛和呼吸道有刺激

性。泄漏处理需使用惰性吸附材料收集，并按危险废弃物处置。运输分类为 UN 3077，需贴注环境危害标识。

注：以上信息基于现有研究数据，具体应用请结合实验验证。