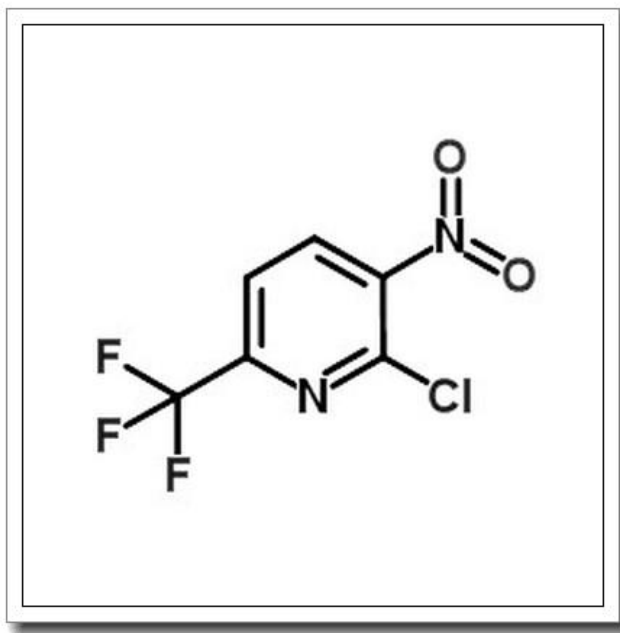


## 2-氯-3-硝基-6-三氟甲基吡啶

*2-Chloro-3-nitro-6-(trifluoromethyl)pyridine*



### 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Chloro-3-nitro-6-(trifluoromethyl)pyridine
中文名称	2-氯-3-硝基-6-三氟甲基吡啶
CAS 号	117519-08-1
分子式	C <sub>6</sub> H <sub>2</sub> ClF <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	226.54
纯度	>96%

## 产品说明

### 2-氯-3-硝基-6-三氟甲基吡啶产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

2-氯-3-硝基-6-三氟甲基吡啶 (CAS 号: 117519-08-1) 是一种含氟吡啶衍生物, 分子式为  $C_6H_2ClF_3N_2O_2$ , 分子量 226.54。该化合物为淡黄色至类白色结晶粉末, 纯度  $\geq 96\%$ , 具有显著的电子效应和空间位阻特性。其结构中氯原子、硝基和三氟甲基的协同作用使其成为高反应活性的中间体, 尤其在亲核取代和偶联反应中表现突出。

#### 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, 其硝基和氯原子可作为活性位点参与多种生物分子修饰反应。三氟甲基的强吸电子性显著增强分子脂溶性, 使其在药物化学中常用于先导化合物的结构优化, 尤其在抗肿瘤和抗菌药物研发中具有潜在应用价值。该分子还可作为酶抑制剂研究的探针分子, 用于探索蛋白质结合位点的疏水相互作用机制。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

在医药领域, 本品是合成抗感染药物和激酶抑制剂的关键中间体; 在农药化学中, 用于构建含氟杀虫剂和除草剂的活性核心结构; 在材料科学方面, 可作为液晶材料的改性单体。实验室常用作有机合成中的定向硝化反应模板, 或通过钯催化交叉偶联反应构建复杂杂环体系。

#### 4. 储存条件与使用建议

需密封保存于  $-20^{\circ}C$  至  $4^{\circ}C$  的干燥环境中, 避免光照和湿气。开封后建议充氮保护并尽快使用。操作时应佩戴化学防护手套、护目镜及防毒面具, 在通风橱中进行称量与反应。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、DMF 等有机溶剂, 水溶性极低 ( $< 0.1 \text{ mg/mL}$ ), 配制溶液时需选择合适助溶剂。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ , 残留溶剂符合 USP 标准。MSDS 数据显示其属于刺

激性化学品（GHS 分类：皮肤腐蚀/刺激类别 2），接触后需立即用大量清水冲洗。废弃物处理应遵守当地危险化学品管理条例，禁止直接排入下水系统。运输时按 UN2811 标准包装，远离食品和饲料存放。

注：具体实验方案建议参考文献方法（如 *J. Med. Chem.* 2015, 58, 3），使用前请务必查阅最新版安全数据表。