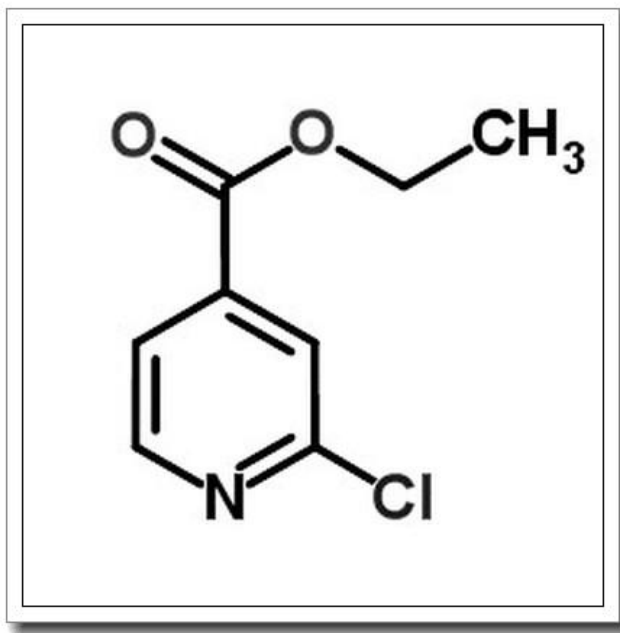


2-氯异烟酸乙酯

Ethyl 2-Chloroisonicotinate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 2-Chloroisonicotinate
中文名称	2-氯异烟酸乙酯
CAS 号	54453-93-9
分子式	C ₈ H ₈ ClN ₂ O ₂
分子量	185.608
纯度	>96%

产品说明

2-氯异烟酸乙酯产品说明书

产品概述与化学特性

2-氯异烟酸乙酯 (Ethyl 2-Chloroisonicotinate, CAS 号 54453-93-9) 是一种重要的有机合成中间体, 分子式为 $C_8H_8ClNO_2$, 分子量 185.608。本品为无色至淡黄色液体或结晶, 纯度大于 96%, 具有典型的酯类气味。其化学结构中包含氯原子和酯基, 赋予其较高的反应活性, 易于参与亲核取代、酯交换等反应。

生物化学功能与重要性

作为吡啶类衍生物, 2-氯异烟酸乙酯在生物化学领域主要用于构建含氮杂环化合物。其氯原子可作为活性位点与生物分子 (如蛋白质或核酸) 发生特异性结合, 因此在药物研发中常用于修饰先导化合物结构, 以优化其药理活性或代谢稳定性。

主要应用领域与具体用途

1. 医药中间体: 用于合成抗结核药物、抗炎药及中枢神经系统药物, 如异烟肼类衍生物。
2. 农药合成: 作为杀菌剂或杀虫剂的关键结构单元, 例如吡虫啉类化合物的前体。
3. 材料科学: 参与制备液晶材料或功能性高分子单体。
4. 科研试剂: 在有机合成实验中用于构建复杂杂环体系。

储存条件与使用建议

本品需密封保存于阴凉干燥处, 推荐温度 2-8°C, 避免光照与潮湿环境。开封后建议充氮保护以延长稳定性。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入蒸汽。溶解性测试表明其易溶于乙醇、丙酮等有机溶剂, 水溶性较低, 配制溶液时需选择合适的溶剂体系。

质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度, 批次报告可提供详细色谱数据。安全数据如下:

1. 危害标识: 刺激性 (Xi), 可能引起皮肤、眼睛及呼吸道刺激。

2. 防护措施: 佩戴丁腈手套、护目镜及防毒面具, 接触后立即用大量清水冲洗。
3. 应急处理: 泄漏时用惰性吸附材料处理, 废弃物按危险化学品规范处置。
4. 运输分类: UN 编号未列明, 但建议按一般化学品运输, 避免与强氧化剂混装。

注: 本说明基于现有实验数据编制, 实际应用前请查阅最新文献或进行小试验证。