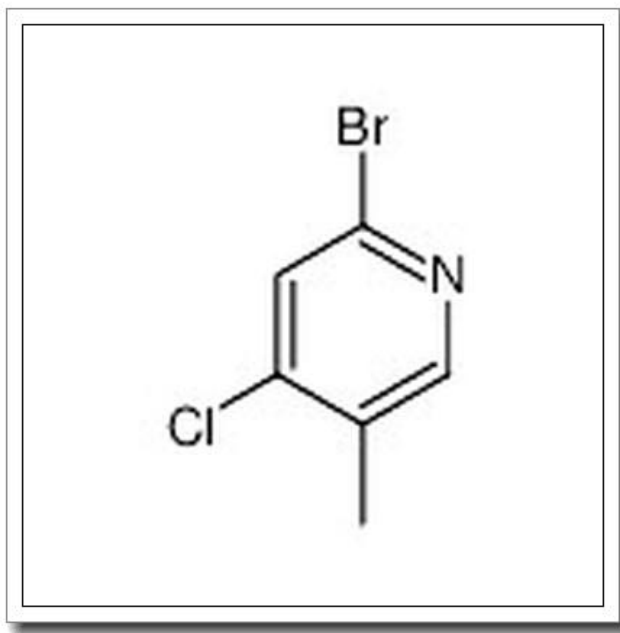


2-溴-4-氯-5-甲基吡啶

2-Bromo-4-chloro-5-methylpyridine



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Bromo-4-chloro-5-methylpyridine
中文名称	2-溴-4-氯-5-甲基吡啶
CAS 号	1033203-40-5
分子式	C ₆ H ₅ BrClN
分子量	206.468
纯度	>96%

产品说明

2-溴-4-氯-5-甲基吡啶产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-溴-4-氯-5-甲基吡啶 (CAS 号: 1033203-40-5) 是一种重要的卤代吡啶衍生物, 分子式为 C_6H_5BrClN , 分子量 206.468。该化合物为白色至类白色结晶粉末, 纯度 >96%, 具有典型吡啶环的芳香性特征。其结构中溴原子和氯原子的引入显著增强了反应活性, 而甲基的位阻效应使其在偶联反应中表现出独特的选择性。该物质易溶于有机溶剂如二氯甲烷、乙醇, 微溶于水 (25°C 时溶解度 < 0.1g/100mL)。

2. 生物化学功能与重要性

作为多功能合成砌块, 该化合物在药物化学中具有核心价值。吡啶环结构是众多生物活性分子的关键药效团, 其卤素取代位点可通过 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等反应高效构建 C-C 或 C-N 键。特别适用于激酶抑制剂、抗病毒药物及农用化学品中间体的合成, 例如可用于制备 EGFR 抑制剂类抗癌药物的核心骨架。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本品主要用于: 1) 蛋白激酶抑制剂的结构修饰; 2) HIV 整合酶抑制剂的合成前体; 3) 抗菌药物分子骨架构建。在材料科学中, 可作为有机发光二极管 (OLED) 材料的功能化单体。农业化学领域常用于新型杀虫剂 (如新烟碱类衍生物) 的中间体制备。典型反应包括钯催化交叉偶联、亲核取代及金属化反应等。

4. 储存条件与使用建议

建议储存于 -20°C 至 4°C 的惰性气体 (如氩气) 环境中, 避光密封保存。开封后建议充氮保护并尽快使用。使用时应佩戴化学防护手套、护目镜, 在通风橱中操作。溶解性测试表明, 推荐使用无水 DMF 或 THF 作为反应溶剂。避免与强氧化剂、强酸接触, 防止脱卤副反应发生。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC（面积归一化法）检测纯度 $\geq 96\%$ ，水分含量 $\leq 0.5\%$ （Karl Fischer 法），残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据：急性毒性（口服，大鼠） $LD_{50} > 500\text{mg/kg}$ ；皮肤刺激类别 2；对水生生物具有长期危害性。废弃物处理需遵循当地危险化学品处置法规，建议采用专业焚烧法处理。提供完整的 COA（质量分析证书）和 MSDS（材料安全数据表）备案。