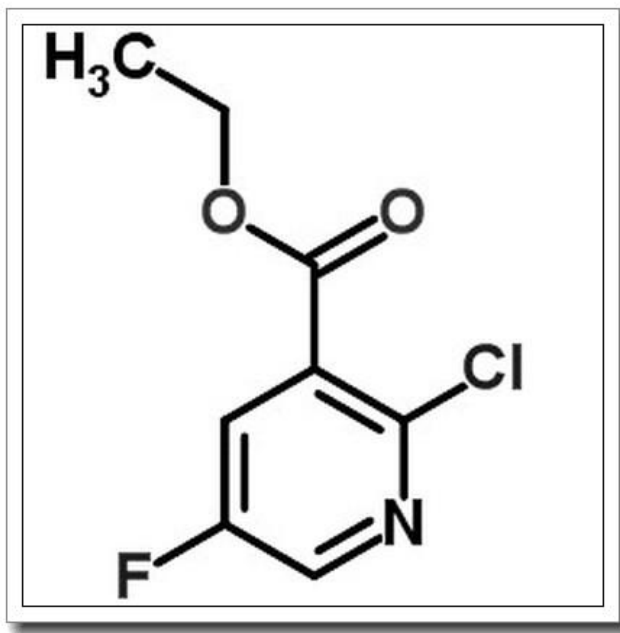


2-氯-5-氟烟酸乙酯

Ethyl 2-chloro-5-fluoronicotinate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 2-chloro-5-fluoronicotinate
中文名称	2-氯-5-氟烟酸乙酯
CAS 号	139911-30-1
分子式	C ₈ H ₇ ClFN ₂ O ₂
分子量	203.598
纯度	>96%

产品说明

2-氯-5-氟烟酸乙酯产品说明

1. 产品概述与化学特性

2-氯-5-氟烟酸乙酯 (Ethyl 2-chloro-5-fluoronicotinate, CAS 号 139911-30-1) 是一种重要的含氟杂环化合物, 分子式为 $C_8H_7ClFN_2$, 分子量 203.598。本品为白色至类白色结晶或粉末, 纯度 >96%, 具有显著的化学稳定性和反应活性。其结构中的氯原子和氟原子赋予其独特的电子效应, 使其成为有机合成中的关键中间体。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为烟酸衍生物, 其分子中的卤素取代基 (氯和氟) 可显著增强其与生物靶标的相互作用能力。在药物化学中, 此类结构常用于调节分子的脂溶性、代谢稳定性和靶点亲和力, 尤其适用于抗肿瘤、抗病毒及中枢神经系统药物的研发。

3. 主要应用领域与具体用途

2-氯-5-氟烟酸乙酯主要用于医药和农药中间体的合成。在医药领域, 它是制备氟喹诺酮类抗生素和激酶抑制剂的重要前体; 在农药领域, 可用于开发高效低毒的含氟杀虫剂和除草剂。此外, 在材料科学中, 其衍生物可作为液晶材料的改性单元。

4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于干燥、阴凉处 (建议温度 2-8°C), 避免光照和潮湿环境。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粉尘。溶解性测试表明, 其易溶于二氯甲烷、DMF 等有机溶剂, 难溶于水。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行严格质量控制, 确保纯度 >96%。安全数据表明, 其具有刺激性, 操作时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。若接触皮肤, 需立即用大量清水冲洗。废弃物处置需符合当地环保法规, 建议交由专业化学品回收机构处理。

(注: 以上信息基于实验室数据, 实际应用前请务必查阅最新文献并开展小试验证。)