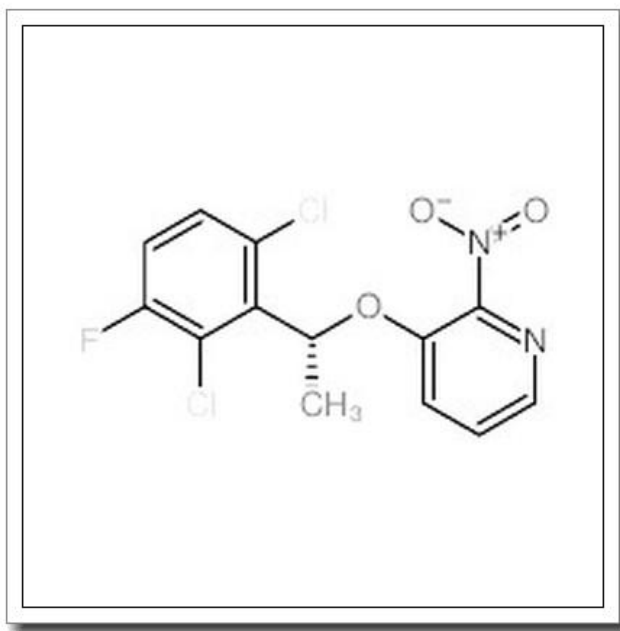


3-[[[(1R)-1-(2,6-二氯-3-氟苯基)乙基]氧基]-2-硝基吡啶

(R)-3-(1-(2,6-Dichloro-3-fluorophenyl)ethoxy)-2-nitropyridine



产品基本信息

属性	值
化学名称	(R)-3-(1-(2,6-Dichloro-3-fluorophenyl)ethoxy)-2-nitropyridine
中文名称	3-[[[(1R)-1-(2,6-二氯-3-氟苯基)乙基]氧基]-2-硝基吡啶
CAS 号	877397-70-1
分子式	C13H9Cl2FN2O3
分子量	331.127
纯度	>96%

产品说明

3-[[(1R)-1-(2,6-二氯-3-氟苯基)乙基]氧基]-2-硝基吡啶产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至淡黄色结晶性粉末，化学名为(R)-3-(1-(2,6-二氯-3-氟苯基)乙氧基)-2-硝基吡啶，CAS号 877397-70-1，分子式 C₁₃H₉Cl₂FN₂O₃，分子量 331.127。其结构中含手性中心（R构型）、硝基吡啶骨架及卤代苯基团，赋予其特定极性（LogP 约 2.8）和熔点范围（128-132℃）。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为小分子抑制剂的核心片段，可通过硝基吡啶基团参与氢键相互作用，而卤代苯基增强疏水结合能力。其手性结构对靶标蛋白（如激酶或 G 蛋白偶联受体）的选择性抑制具有关键意义，常用于先导化合物优化阶段的结构-活性关系（SAR）研究。

3. 主要应用领域与具体用途

在药物研发中，主要用于以下方向：

- 抗肿瘤药物开发：作为 EGFR 或 VEGFR 抑制剂的结构类似物
- 炎症性疾病研究：调控 NF-κB 等炎症通路
- 农药活性分子：作用于昆虫神经系统烟碱型受体

实验室用途包括：

- 有机合成中间体：用于构建复杂杂环体系
- 放射性标记前体：硝基可还原为氨基进行同位素标记

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃、避光、惰性气体（如氩气）保护的密封容器中，有效期 24 个月。使用前需室温平衡 30 分钟以避免吸湿。建议在通风橱中操作，溶解时优先选用无水 DMSO 或乙醇（溶解度分别为 25 mg/mL 和 8 mg/mL）。工作浓度需根据实验体系预先进行细胞毒性测试。

5. 质量控制与安全信息

批质检报告包含:

- 纯度 (HPLC 面积归一法): $\geq 96\%$
- 手性异构体 (Chiral HPLC): $\leq 1.5\%$
- 重金属 (ICP-MS): < 10 ppm

安全数据:

- GHS 分类: 皮肤刺激 (Category 2)、急性毒性 (口服 Category 4)
- 防护措施: 穿戴丁腈手套、护目镜及防尘口罩
- 应急处理: 皮肤接触时立即用肥皂水冲洗 15 分钟, 眼睛暴露需用生理盐水冲洗并就医

废弃物应作为有害化学品处置, 符合当地环保法规。

注: 本产品仅限科研用途, 不可用于人体或食品相关领域。具体实验方案建议查阅相关文献或咨询专业技术支持。