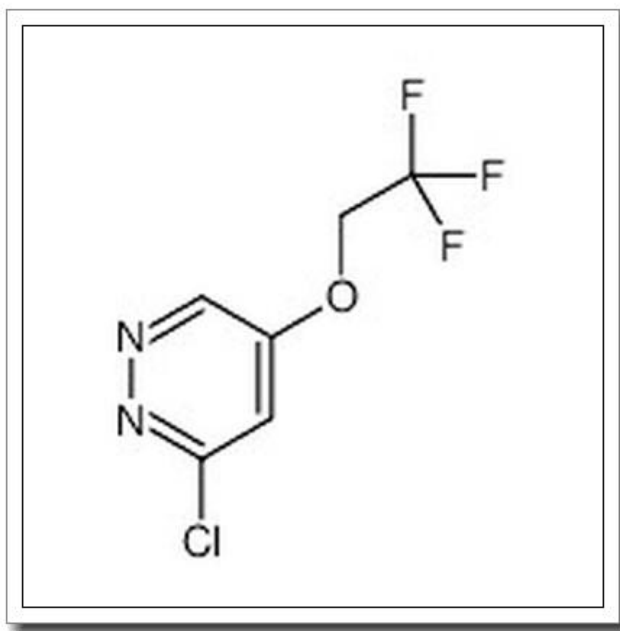


3-Chloro-5-(2,2,2-trifluoroethoxy)pyridazine

3-Chloro-5-(2,2,2-trifluoroethoxy)pyridazine



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-Chloro-5-(2,2,2-trifluoroethoxy)pyridazine
中文名称	3-氯-5-(2,2,2-三氟乙氧基)吡啶嗪
CAS 号	1346691-33-5
分子式	C ₆ H ₄ ClF ₃ N ₂ O
分子量	212.557
纯度	>96%

产品说明

3-Chloro-5-(2,2,2-trifluoroethoxy)pyridazine 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 3-氯-5-(2,2,2-三氟乙氧基)吡嗪，CAS 号 1346691-33-5，分子式 C₆H₄ClF₃N₂O，分子量 212.557。其结构中含氯原子和三氟乙氧基团，赋予分子较高的极性和稳定性。纯度经 HPLC 验证大于 96%，熔点为 78-82℃，易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为吡嗪类衍生物，具有显著的电子效应和空间位阻特性。三氟乙氧基的强吸电子能力使其成为医药中间体和农药合成中的关键砌块，尤其在构建含氟生物活性分子时，可显著改善化合物的代谢稳定性和膜穿透性。其氯原子为后续偶联反应提供了活性位点。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于以下领域：

- (1) 医药研发：作为激酶抑制剂和抗肿瘤药物的核心片段，用于 EGFR 或 VEGFR 靶向药物的结构优化。
- (2) 农药化学：合成新型含氟杀虫剂和除草剂，如磺酰脲类化合物的前体。
- (3) 材料科学：制备含氟液晶材料或光电功能分子的中间体。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃、避光、干燥的惰性气体环境中，有效期 24 个月。开封后建议充氮保存。使用前需恢复至室温并充分干燥，称量时需在通风橱中进行。推荐用无水 DMSO 配制母液（浓度≤50 mM），避免反复冻融。

5. 质量控制与安全信息

批次纯度通过 HPLC (C18 柱，乙腈/水梯度洗脱) 和 LC-MS 双重验证，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据：急性毒性 (LD₅₀ 大鼠口服) >500 mg/kg，皮肤刺激

性类别 3。操作时需佩戴护目镜、防化手套，若接触皮肤应立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物处置需符合当地危险化学品管理法规。

本产品仅限科研用途，不可用于人体或食品相关领域。更多技术参数请索取 COA 报告。