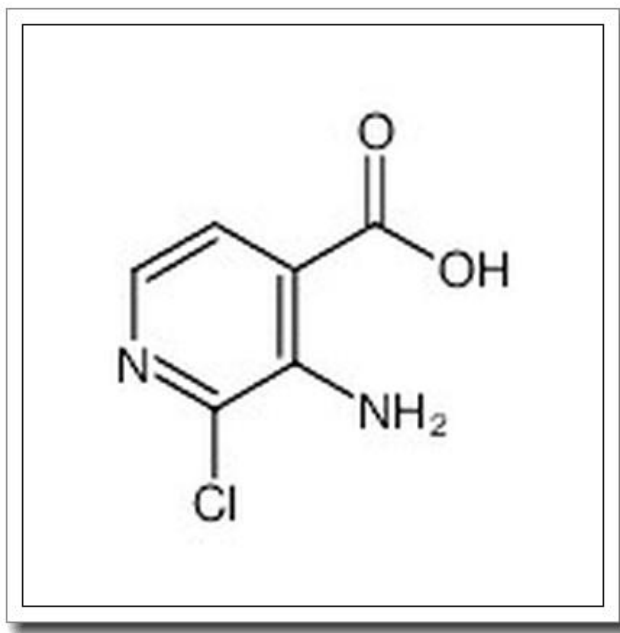


3-氨基-2-氯异烟酸

3-Amino-2-chloroisonicotinic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-Amino-2-chloroisonicotinic acid
中文名称	3-氨基-2-氯异烟酸
CAS 号	58483-94-6
分子式	C ₆ H ₅ ClN ₂ O ₂
分子量	172.569
纯度	>96%

产品说明

3-氨基-2-氯异烟酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-氨基-2-氯异烟酸 (3-Amino-2-chloroisonicotinic acid, CAS 号 58483-94-6) 是一种杂环羧酸衍生物, 分子式为 $C_6H_5ClN_2O_2$, 分子量 172.569。本品为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 >96%, 具有显著的芳香性和两性特性 (同时含氨基与羧基)。其结构中氯原子和氨基的邻位取代赋予其独特的反应活性, 易参与亲核取代、缩合等反应, 是合成医药及农药中间体的关键骨架。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡啶类化合物的衍生物, 该分子可通过羧基与氨基的修饰参与生物活性分子的构建。其氯原子可作为活性位点与生物大分子 (如酶或受体) 特异性结合, 而羧基则增强水溶性, 优化药物代谢性质。在药物化学中, 此类结构常作为激酶抑制剂或抗菌剂的母核, 具有调控细胞信号通路的潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

医药领域: 用于合成抗肿瘤、抗感染药物 (如异烟肼类衍生物) 及中枢神经系统药物中间体。

农药领域: 作为除草剂或杀虫剂的功能片段, 例如含吡啶环的氯代烟碱类化合物。

材料科学: 参与配位聚合物的制备, 或作为有机合成中的定向官能化试剂。

4. 储存条件与使用建议

储存条件: 密封避光, 置于干燥、阴凉处 (建议 2-8°C), 避免与强氧化剂、酸碱接触。

使用建议: 实验操作需在通风橱中进行, 佩戴防护手套与护目镜; 溶解性测试显示其易溶于极性有机溶剂 (如 DMF、DMSO), 水溶性较低, 建议先用少量碱助溶。

5. 质量控制与安全信息

质量控制: 通过 HPLC 检测纯度, 核磁共振 (NMR) 验证结构, 残留溶剂符合 ICH 标准。

安全信息: 本品对眼睛和皮肤有刺激性 (GHS 分类: H315-H319), 不慎接触时需用大量清水冲洗。废弃物应作为有害化学废物处理, 避免环境释放。

(注: 本说明基于现有实验数据, 具体应用需进一步验证。安全操作请参考 MSDS 文件。)