

3-溴甲基吡啶-2-羧酸甲酯

methyl 3-(bromomethyl)pyridine-2-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 3-(bromomethyl)pyridine-2-carboxylate
中文名称	3-溴甲基吡啶-2-羧酸甲酯
CAS 号	116986-09-5
分子式	C8H8BrNO2
分子量	230.059
纯度	>96%

产品说明

3-溴甲基吡啶-2-羧酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-溴甲基吡啶-2-羧酸甲酯 (methyl 3-(bromomethyl)pyridine-2-carboxylate) 是一种重要的有机合成中间体，化学式为 $C_8H_8BrNO_2$ ，分子量为 230.059，CAS 号为 116986-09-5。本品为白色至淡黄色结晶或粉末，纯度 >96%，具有典型的吡啶环结构和活性溴甲基官能团，易于参与亲核取代反应。其熔点和沸点数据需参考具体实验条件，建议在干燥惰性气氛下保存以避免分解。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在药物化学和材料科学中具有关键作用。其吡啶环可作为配体与金属离子结合，而溴甲基位点则为后续衍生化提供反应位点，常用于构建杂环化合物或功能化分子。在生物活性分子合成中，它是制备抗肿瘤、抗炎或抗菌类药物的关键砌块，例如用于合成激酶抑制剂或抗生素衍生物。

3. 主要应用领域与具体用途

3-溴甲基吡啶-2-羧酸甲酯广泛应用于医药研发、农药合成及功能材料领域。在医药中，用于构建吡啶并环体系或引入羧酸甲酯修饰；在农药领域，可作为杀虫剂或杀菌剂的中间体；在材料科学中，可用于合成光电材料或配位聚合物。具体实验需在惰性气体保护下进行，例如通过 Suzuki 偶联或亲核取代反应扩展其结构多样性。

4. 储存条件与使用建议

本品需避光、密封保存于 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 的干燥环境中，长期储存建议充入惰性气体（如氮气）。开封后应尽快使用，避免反复冻融。操作时需佩戴防护手套、护目镜及防毒面具，在通风橱中进行称量与反应。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂，水溶性较差，建议预先优化溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 >96%，批次间稳定性良好。MS 和 NMR 数据可随 COA 提供。

安全信息显示其为刺激性化合物，可能引起皮肤、眼睛及呼吸道刺激，CAS 号 116986-09-5 对应的 GHS 分类包含 H315-H319-H335。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地法规，建议通过专业化学废弃物回收机构处置。