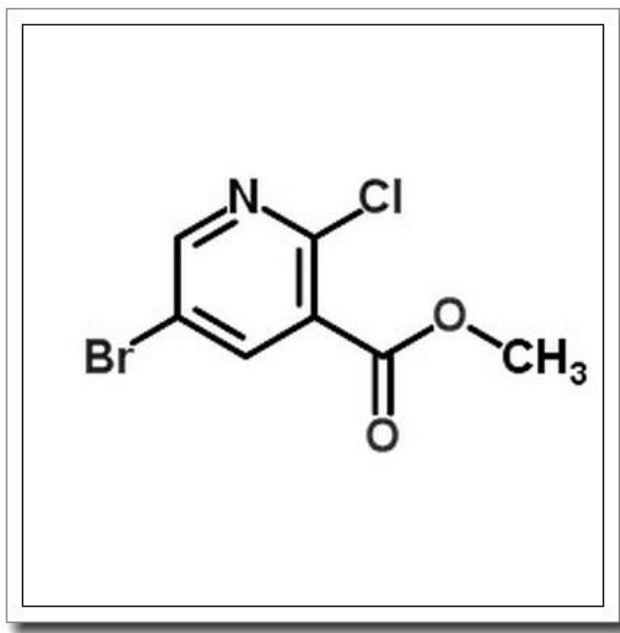


5-溴-2-氯烟酸甲酯

Methyl 5-bromo-2-chloronicotinate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 5-bromo-2-chloronicotinate
中文名称	5-溴-2-氯烟酸甲酯
CAS 号	78686-79-0
分子式	C ₇ H ₅ BrClN ₂ O ₂
分子量	250.477
纯度	>96%

产品说明

5-溴-2-氯烟酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-溴-2-氯烟酸甲酯 (Methyl 5-bromo-2-chloronicotinate) 是一种重要的烟酸衍生物，化学式为 $C_7H_5BrClN_2O_2$ ，分子量 250.477，CAS 号为 78686-79-0。本品为白色至类白色结晶或粉末，纯度高于 96%，具有典型的酯类特征性气味。其结构中包含溴和氯取代基，赋予其较高的反应活性，尤其在亲核取代和交叉偶联反应中表现突出。

2. 生物化学功能与重要性

作为烟酸类化合物的修饰衍生物，5-溴-2-氯烟酸甲酯是合成多种生物活性分子的关键中间体。其卤素取代基使其易于参与 Suzuki、Buchwald-Hartwig 等偶联反应，广泛应用于医药和农药领域。该化合物在构建杂环骨架时表现出优异的区域选择性，是研发抗肿瘤、抗病毒药物的重要砌块。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于有机合成和药物研发领域。在医药化学中，常用于合成酪氨酸激酶抑制剂和核苷类似物前体；在农药领域，可作为杀虫剂和杀菌剂的中间体。此外，在材料科学中，其衍生物可用于制备光电功能材料。实验室中常通过其卤素活性位点进一步官能团化，构建复杂分子结构。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 的干燥环境中，避免光照和湿气。开封后需充惰性气体保护以防止降解。使用时应佩戴防护手套、护目镜，并在通风橱中操作。溶解性测试表明，本品易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂，微溶于水。反应投料前建议进行氮气保护以提升稳定性。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，残留溶剂符合 USP 标准。MSDS 数据显示其为刺激性化合物，皮肤接触可能引起红肿，操作后需彻底清洗。废弃物应作为有害化学废

料处理，不可直接排放。运输分类为 UN 3077，需符合危险化学品运输规范。如发生泄漏，需用惰性吸附材料处理并通风稀释。

注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件优化。更多技术参数可联系技术支持获取。