

# Methyl 2-chloro-3-(trifluoromethyl)isonicotinate

产品图片未找到

## 产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 2-chloro-3-(trifluoromethyl)isonicotinate
产品目录号	
CAS 号	1227575-06-5
分子式	C8H5ClF3N2O2
分子量	239.58
纯度	>96%

## 产品说明

### 2-氯-3-(三氟甲基)异烟酸甲酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 2-氯-3-(三氟甲基)异烟酸甲酯 (Methyl 2-chloro-3-(trifluoromethyl)isonicotinate), CAS 登记号 1227575-06-5, 分子式  $C_8H_5ClF_3N_2O_2$ , 分子量 239.58。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度经 HPLC 测定大于 96%, 具有典型的含氟杂环化合物特征结构, 其结构中同时包含氯代吡啶环和三氟甲基活性基团, 赋予其特殊的化学反应活性。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为含氟吡啶类衍生物, 该化合物在药物化学中具有重要价值。三氟甲基的强吸电子效应可显著改变分子电子云分布, 增强其与生物靶点的结合能力。氯原子的存在进一步提高了分子的可修饰性, 使其成为合成抗感染药物、抗肿瘤先导化合物的关键中间体。在农药化学领域, 该结构片段也常见于新型杀虫剂和除草剂的活性分子设计中。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域:

医药研发: 作为 EGFR 抑制剂、JAK 激酶抑制剂等小分子药物的核心合成砌块

农药开发: 用于构建新型拟除虫菊酯类化合物的吡啶环结构

材料科学: 可作为含氟液晶材料的合成前体

具体用途包括但不限于: 有机合成中的亲核取代反应、Suzuki 偶联反应的底物、金属催化交叉偶联反应的起始原料。

#### 4. 储存条件与使用建议

长期储存应置于  $-20^{\circ}\text{C}$ 、干燥惰性气体 (如氩气) 保护的密闭容器中, 短期使用可存放于  $2-8^{\circ}\text{C}$  干燥环境。建议开封后一次性使用完毕, 若需分次使用, 应在手套箱中操作。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、DMF 等有机溶剂, 使用时需配备适当的通风设备。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品经 GC-MS 和 NMR 双重验证，杂质含量符合行业标准。安全数据表明该化合物具有刺激性，操作时应穿戴防护眼镜、防化手套和实验服。MSDS 数据显示其急性毒性类别为 4 级，不慎接触时需立即用大量清水冲洗。废弃物处理应按照危险化学品处置规范执行，禁止直接排入下水系统。

注：本产品仅限科研用途，不适用于临床、诊断或家庭使用。具体应用前请务必查阅最新文献资料确认合成路线。