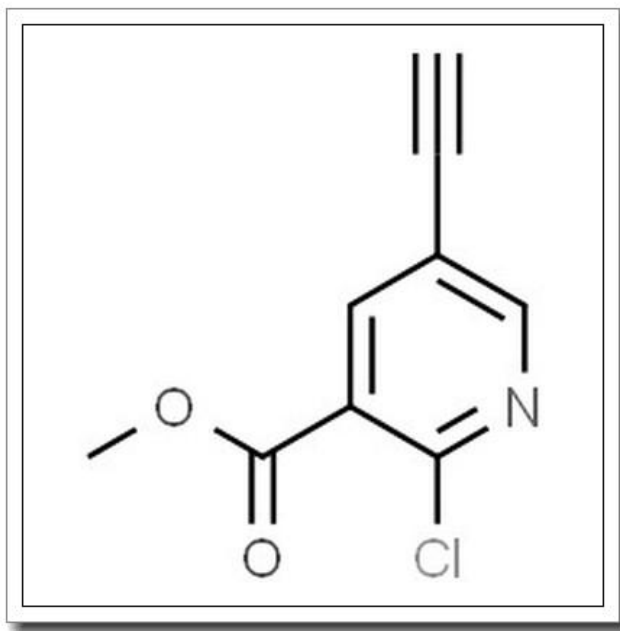


# Methyl 2-chloro-5-ethynylnicotinate

*Methyl 2-chloro-5-ethynylnicotinate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 2-chloro-5-ethynylnicotinate
中文名称	Methyl 2-chloro-5-ethynylnicotinate
CAS 号	1256794-68-9
分子式	C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> ClN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	195.602
纯度	>96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

Methyl 2-chloro-5-ethynylnicotinate (化学名称: 2-氯-5-乙炔基烟酸甲酯) 是一种有机化合物, CAS 号为 1256794-68-9, 分子式为  $C_9H_6ClN_2O_2$ , 分子量为 195.602。该化合物为白色至淡黄色结晶或粉末, 纯度通常高于 96%。其结构中含有氯原子和乙炔基团, 使其在化学反应中表现出较高的活性, 尤其在偶联反应和杂环合成中具有重要价值。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为一种烟酸衍生物, Methyl 2-chloro-5-ethynylnicotinate 在生物化学领域主要用于构建复杂杂环结构的前体。其乙炔基团可通过点击化学 (Click Chemistry) 与叠氮化合物发生环加成反应, 形成稳定的三唑结构。这一特性使其在药物研发和生物标记领域具有广泛应用潜力。此外, 氯原子的存在使其易于进一步功能化, 为合成多样性分子提供了便利。

### 3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于医药中间体和有机合成领域。在药物研发中, 它可作为构建抗病毒、抗肿瘤或中枢神经系统药物活性分子的关键片段。例如, 其衍生物可能用于激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂的合成。在材料科学中, 其乙炔基团可用于制备功能性聚合物或共轭材料。此外, 它还常用于学术研究中的分子探针设计和标记实验。

### 4. 储存条件与使用建议

建议将产品密封保存于  $-20^{\circ}C$  或更低的干燥环境中, 避免光照和潮湿。开封后应在惰性气体 (如氮气) 保护下使用, 以防止氧化或降解。使用时需在通风良好的环境中操作, 并佩戴适当的个人防护装备 (如手套、护目镜和实验服)。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和部分有机溶剂, 但在水中溶解度较低。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确认纯度 $\geq 96\%$ ，并提供完整的质谱（MS）和核磁共振（NMR）分析报告。安全数据表明，该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激，操作时应避免直接接触。如不慎接触，应立即用大量清水冲洗并寻求医疗帮助。废弃物处理需符合当地化学品处置法规，不可直接排入下水道或自然环境。

以上信息仅供参考，具体实验条件需根据实际需求优化。建议用户在首次使用前查阅相关文献并评估实验风险。