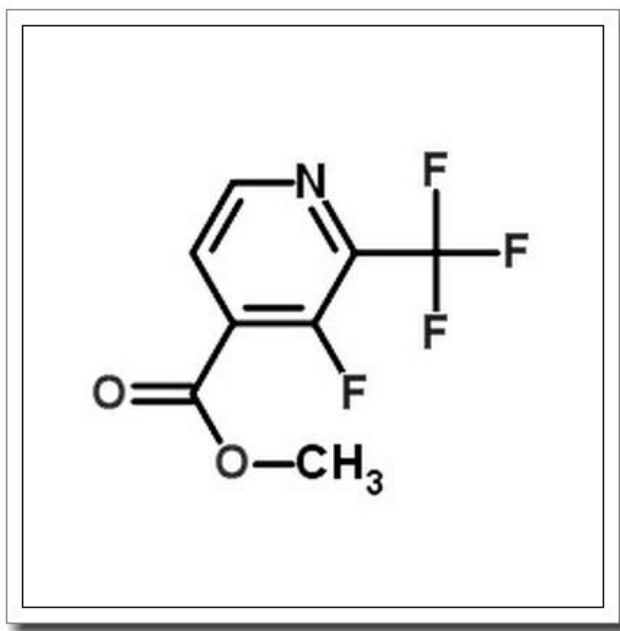


Methyl 3-fluoro-2-(trifluoromethyl)isonicotinate

Methyl 3-fluoro-2-(trifluoromethyl)isonicotinate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 3-fluoro-2-(trifluoromethyl)isonicotinate
中文名称	Methyl 3-fluoro-2-(trifluoromethyl)isonicotinate
CAS 号	1227594-82-2
分子式	C ₈ H ₅ F ₄ N ₂ O ₂
分子量	223.124
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

Methyl 3-fluoro-2-(trifluoromethyl)isonicotinate (中文名称: 3-氟-2-(三氟甲基)异烟酸甲酯) 是一种含氟杂环化合物, CAS 号为 1227594-82-2, 分子式为 $C_8H_5F_4NO_2$, 分子量为 223.124。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在, 纯度通常高于 96%。其结构中的氟原子和三氟甲基赋予其独特的电子效应和疏水性, 使其在有机合成和药物化学中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为异烟酸衍生物, 其氟化和三氟甲基化修饰显著增强了其生物活性和代谢稳定性。在药物研发中, 此类结构常用于构建酶抑制剂或受体配体, 特别是在抗感染和抗肿瘤领域。其高电子亲和力和脂溶性使其能够有效穿透细胞膜, 与靶标蛋白结合。

3. 主要应用领域与具体用途

Methyl 3-fluoro-2-(trifluoromethyl)isonicotinate 主要用于医药中间体和农药化学品的合成。在药物化学中, 它是构建含氟杂环骨架的关键原料, 可用于开发新型抗菌剂或抗病毒药物。此外, 在材料科学中, 其含氟特性可用于制备高性能液晶材料或特种聚合物。

4. 储存条件与使用建议

该产品需密封保存于干燥、阴凉的环境中, 推荐储存温度为 2-8°C, 避免光照和潮湿。使用时应在通风良好的实验室条件下操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明, 其易溶于有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇, 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 检测确保纯度 $\geq 96\%$, 并严格符合化学品安全技术说明书 (MSDS) 标准。其可能对眼睛、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, 需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照危险化学品处理规范处置。

以上信息仅供参考，具体实验设计需结合实际需求和安全评估进行。