

Methyl 4,6-dichloronicotinate

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 4,6-dichloronicotinate
产品目录号	
CAS 号	65973-52-6
分子式	C7H5Cl2NO2
分子量	206.026
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

甲基 4,6-二氯烟酸酯 (Methyl 4,6-dichloronicotinate) 是一种重要的有机合成中间体, 化学式为 $C_7H_5Cl_2NO_2$, 分子量为 206.026, CAS 号为 65973-52-6。本品为白色至类白色结晶或粉末, 纯度大于 96%, 具有典型的酯类特征气味。其结构中包含二氯取代的吡啶环和甲酯基团, 赋予其较高的反应活性, 尤其在亲核取代反应中表现突出。该化合物在常温下稳定, 但需避免强氧化剂和强酸强碱环境。

2. 生物化学功能与重要性

作为烟酸衍生物, 该化合物是合成多种生物活性分子的关键前体, 尤其在农药和医药领域具有重要价值。其结构中的二氯吡啶骨架是许多除草剂 (如吡啶类除草剂) 的核心结构, 同时也可用于构建抗病毒和抗肿瘤药物的活性基团。在生物化学研究中, 它常作为探针分子用于酶抑制机制研究或金属离子配位化学的模型化合物。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于以下领域:

- 1) 农用化学品合成: 作为高效除草剂 (如二氯吡啶酸类) 的中间体;
- 2) 医药研发: 用于构建抗 HIV 药物和激酶抑制剂的吡啶环结构;
- 3) 材料科学: 作为配体参与金属有机框架 (MOF) 材料的制备;
- 4) 学术研究: 在有机方法学中作为卤代芳烃的模板底物。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 的干燥环境中避光保存, 开封后需充惰性气体保护。使用时应佩戴防护手套、护目镜及防毒面具, 操作环境需具备良好通风条件。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 ($<0.1\text{ g/L}$, $25^{\circ}C$)。建议现配现用, 避免长期储存溶液状态。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 重金属含量 $< 10\text{ ppm}$, 符合实验室级化学品标准。安全数据表明, 该物质对眼睛和皮肤有刺激性 (GHS 分类: Eye Irrit. 2,

Skin Irrit. 2), 吸入或误食可能造成呼吸道和消化道损伤。泄漏处理需使用惰性吸附材料收集, 废液应作为危险化学品处置。实验记录建议参照《化学试剂管理规范》GB/T 24777-2009 执行。

注: 具体实验方案需结合目标反应体系优化, 建议参考文献: J. Agric. Food Chem. 2015, 63, 38-45 (农药应用); Bioorg. Med. Chem. Lett. 2018, 28, 1236-1240 (医药合成)。