

Methyl 6-chloro-3-(trifluoromethyl)-2-pyridinecarboxylate

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 6-chloro-3-(trifluoromethyl)-2-pyridinecarboxylate
产品目录号	
CAS 号	1416354-40-9
分子式	C ₈ H ₅ ClF ₃ N ₂ O ₂
分子量	239.579
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

甲基 6-氯-3-(三氟甲基)-2-吡啶甲酸酯 (Methyl 6-chloro-3-(trifluoromethyl)-2-pyridinecarboxylate) 是一种含氯和三氟甲基取代的吡啶甲酸酯类化合物, CAS 号为 1416354-40-9。其分子式为 $C_8H_5ClF_3NO_2$, 分子量为 239.579, 常温下通常为白色至类白色固体或结晶粉末。该化合物具有较高的化学稳定性, 纯度标准大于 96%, 适合作为精细化工中间体或生物活性分子合成的关键原料。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其吡啶环上的氯和三氟甲基取代基, 表现出独特的电子效应和空间位阻, 使其在药物化学和农药化学中具有重要价值。三氟甲基的强吸电子特性可增强分子与靶标蛋白的相互作用, 而氯原子则可能参与亲核取代反应, 为后续结构修饰提供活性位点。

3. 主要应用领域与具体用途

甲基 6-氯-3-(三氟甲基)-2-吡啶甲酸酯主要用于医药和农药领域的中间体合成。在医药研发中, 它可作为构建抗感染或抗肿瘤药物的吡啶骨架; 在农药领域, 常用于合成高效杀虫剂或除草剂的活性成分。此外, 其衍生物也可能用于材料科学中的功能性分子设计。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品密封保存于干燥、阴凉的环境中, 避免光照和潮湿, 储存温度以 2-8°C 为宜。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明, 该化合物易溶于有机溶剂 (如二甲基亚砜、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, 纯度均一性大于 96%。安全数据表明, 其可能对眼睛、皮肤和呼吸系统产生刺激性, 操作时应佩戴防护手套、护目镜和防尘口罩。若不慎接

触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地环保法规，禁止直接排放至自然环境。

以上信息仅供参考，具体实验或工业应用需结合进一步研究数据。