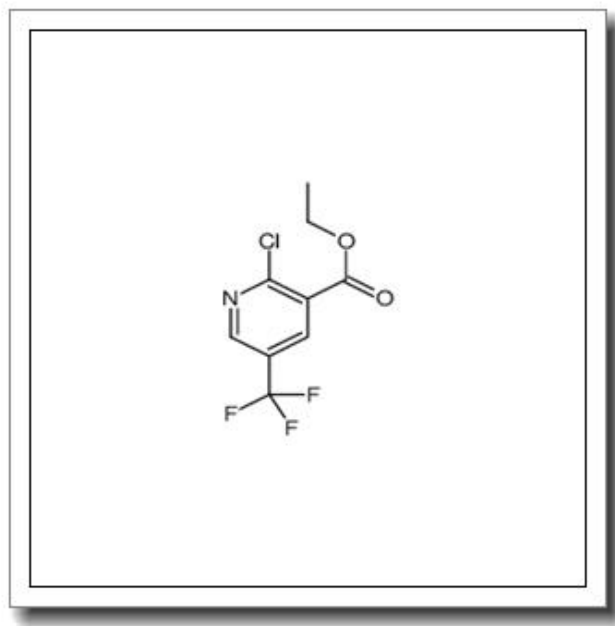


2-氯-5-(三氟甲基)烟酸乙酯

Ethyl 2-chloro-5-(trifluoromethyl)nicotinate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 2-chloro-5-(trifluoromethyl)nicotinate
中文名称	2-氯-5-(三氟甲基)烟酸乙酯
CAS 号	1188265-81-7
分子式	C ₉ H ₇ ClF ₃ N ₂ O ₂
分子量	253.606
纯度	≥96%

产品说明

2-氯-5-(三氟甲基)烟酸乙酯产品说明

1. 产品概述与化学特性

2-氯-5-(三氟甲基)烟酸乙酯 (Ethyl 2-chloro-5-(trifluoromethyl)nicotinate) 是一种重要的含氟杂环化合物, CAS 号为 1188265-81-7, 分子式为 $C_9H_7ClF_3NO_2$, 分子量为 253.606。本品为白色至类白色结晶或粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有较高的化学稳定性。其结构中的三氟甲基和氯原子赋予其独特的电子效应和空间位阻, 使其在有机合成中表现出显著的活性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为烟酸衍生物, 其结构中的杂环和三氟甲基基团使其在生物活性分子设计中具有重要价值。三氟甲基的强吸电子特性可显著调节化合物的脂溶性和代谢稳定性, 因此在药物化学中常用于先导化合物的结构修饰。此外, 氯原子的存在进一步增强了其反应多样性, 使其成为合成复杂杂环化合物的关键中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

2-氯-5-(三氟甲基)烟酸乙酯广泛应用于医药、农药和材料科学领域。在医药研发中, 它是合成抗病毒、抗肿瘤药物的重要中间体, 尤其用于构建含三氟甲基的喹啉或吡啶类活性分子。在农药领域, 可用于制备高效杀虫剂或除草剂。此外, 在功能材料合成中, 其可作为含氟液晶材料或高分子单体的前体。

4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于干燥、阴凉的环境中, 推荐储存温度为 $2-8^{\circ}C$, 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, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。建议佩戴防护手套、护目镜和防尘口罩。开封后需充氮保护以延长保存期限。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度 $\geq 96\%$, 并提供完整的质检报告 (COA)。其安全信息需遵循 GHS 分类: 可能造成皮肤刺激 (H315) 和眼睛刺激 (H319)。操作时应避免

与强氧化剂接触，防止分解产生有害气体。废弃处置需符合当地环保法规，建议通过专业化学品回收机构处理。

以上信息仅供参考，具体实验或生产应用需结合实际情况进一步验证。