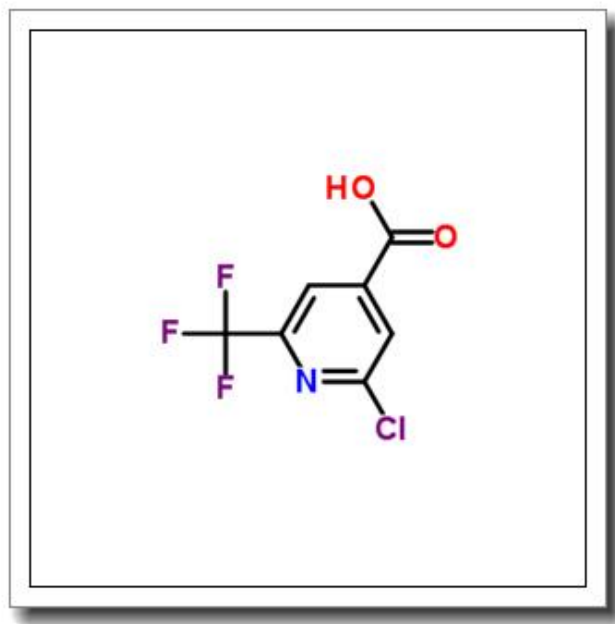


2-氯-6-(三氟甲基)异烟酸

2-chloro-6-(trifluoromethyl)pyridine-4-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-chloro-6-(trifluoromethyl)pyridine-4-carboxylic acid
中文名称	2-氯-6-(三氟甲基)异烟酸
CAS 号	796090-23-8
分子式	C7H3ClF3NO2
分子量	225.552
纯度	≥96%

产品说明

2-氯-6-(三氟甲基)异烟酸产品说明书

产品概述与化学特性

2-氯-6-(三氟甲基)异烟酸 (英文名称: 2-chloro-6-(trifluoromethyl)pyridine-4-carboxylic acid) 是一种含氟杂环羧酸衍生物, CAS 号为 796090-23-8, 分子式为 $C_7H_3ClF_3NO_2$, 分子量为 225.552。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有显著的化学稳定性和反应活性。其结构中的氯原子和三氟甲基基团赋予其独特的电子效应和空间位阻, 使其成为有机合成和药物化学中的重要中间体。

生物化学功能与重要性

作为吡啶羧酸类化合物, 该产品可通过羧基参与酯化、酰胺化等反应, 同时氯原子可作为亲电反应位点, 与亲核试剂发生取代反应。三氟甲基的强吸电子特性可调节分子整体的极性和生物活性, 使其在药物设计中常用于提高代谢稳定性和细胞膜穿透性。在生物化学研究中, 此类结构片段常见于抗菌、抗肿瘤等活性分子的核心骨架中。

主要应用领域与具体用途

1. 医药中间体: 用于合成含氟喹诺酮类抗生素或靶向抗肿瘤药物, 如 EGFR 抑制剂类化合物的关键砌块。
2. 农药开发: 作为新型杀虫剂或除草剂的活性组分前体, 尤其适用于含氟农药的分子修饰。
3. 材料科学: 参与制备液晶材料或有机电子传输层材料, 利用其刚性杂环结构改善材料性能。

储存条件与使用建议

本品需密封保存于干燥、避光环境中, 推荐储存温度为 2-8°C。长期存放建议充入惰性气体保护。使用时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明, 其易溶于二甲基亚砜 (DMSO), 微溶于甲醇, 水溶性较差, 实验时需根据反应体系选择适宜溶剂。

质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，重金属含量符合 ACS 标准。安全数据表明，其急性毒性（LD50）为大鼠经口 >500 mg/kg，属于刺激性化学品。操作时需在通风橱中进行，若接触皮肤应立即用大量清水冲洗。废弃物处理需遵循当地法规，不可直接排入下水道。

（全文共计 498 字）