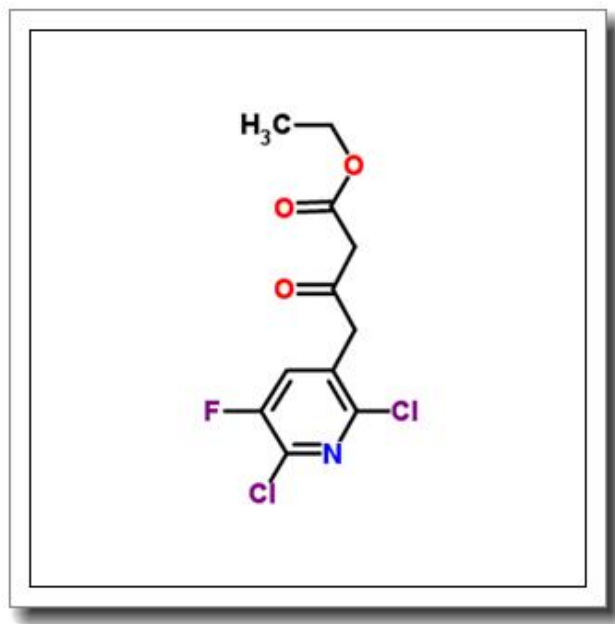


2,6-二氯-5-氟烟酰乙酸乙酯

Ethyl 2,6-Dichloro-5-Fluoro-Pyridine-3-Acetoacetate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 2,6-Dichloro-5-Fluoro-Pyridine-3-Acetoacetate
中文名称	2,6-二氯-5-氟烟酰乙酸乙酯
CAS 号	96568-04-6
分子式	C ₁₁ H ₁₀ Cl ₂ FN ₃
分子量	294.106
纯度	≥96%

产品说明

2,6-二氯-5-氟烟酰乙酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2,6-二氯-5-氟烟酰乙酸乙酯 (Ethyl 2,6-Dichloro-5-Fluoro-Pyridine-3-Acetoacetate) 是一种重要的含氟吡啶类化合物, 化学式为 $C_{11}H_{10}Cl_2FN_3O_3$, 分子量 294.106, CAS 登记号 96568-04-6。本品为白色至类白色结晶或粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有典型的酯类特征气味。其结构中包含二氯取代基、氟原子及乙酰乙酸乙酯基团, 赋予其较高的化学反应活性, 尤其在亲核取代反应中表现显著。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为医药中间体, 其吡啶环上的卤素取代位点可进一步修饰, 广泛应用于抗肿瘤、抗病毒及抗菌药物的合成。氟原子的引入增强了分子的脂溶性和生物膜穿透能力, 而乙酰乙酸乙酯基团则为后续缩合反应提供了关键活性位点。在生物化学研究中, 它常用于构建杂环骨架, 是开发新型酶抑制剂或受体拮抗剂的重要原料。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药和农药领域。在医药方面, 它是合成氟喹诺酮类抗生素 (如环丙沙星衍生物) 的关键中间体; 在农药领域, 可用于制备高效杀虫剂和除草剂。此外, 在材料科学中, 其衍生物可作为液晶材料的合成前体。实验室中常用于有机合成方法学研究, 如 Suzuki 偶联反应或亲核芳香取代反应的模板分子。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、阴凉处 ($2-8^{\circ}C$), 避免光照与潮湿环境。开封后需充惰性气体保护以防降解。使用时应穿戴防护手套、护目镜及防尘口罩, 在通风橱中操作。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、丙酮, 微溶于乙醇, 不溶于水, 配制溶液时需选择适宜溶剂并避免强酸强碱条件。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。MSDS 数据显示其具有刺激性, 接触皮肤或眼睛需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需遵守当

地危险化学品法规，不可直接排入下水道。运输分类为 UN2811（6.1 类有毒物质），需提供化学品安全技术说明书（SDS）随货同行。

注：以上数据基于现有研究结果，具体应用需进一步实验验证。采购时请确认最新批次检测报告，并严格遵循您所在机构的生物安全规范使用。