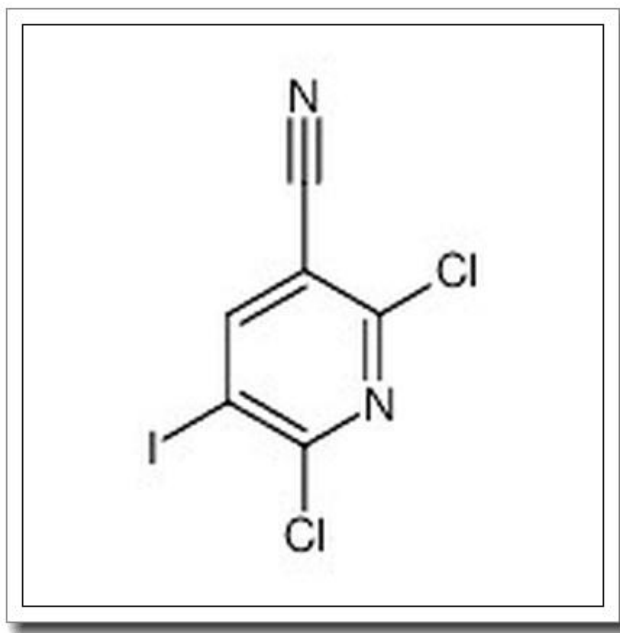


2,6-二氯-5-碘烟腈

2,6-dichloro-5-iodonicotinitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	2,6-dichloro-5-iodonicotinitrile
中文名称	2,6-二氯-5-碘烟腈
CAS 号	1353087-61-2
分子式	C ₆ HCl ₂ IN ₂
分子量	298.896
纯度	>96%

产品说明

2,6-二氯-5-碘烟腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2,6-二氯-5-碘烟腈 (2,6-dichloro-5-iodonicotinonitrile) 是一种卤代烟腈类化合物, 化学式为 $C_6HCl_2IN_2$, 分子量 298.896。该物质为白色至淡黄色结晶粉末, CAS 号为 1353087-61-2, 纯度标准 >96%。其结构特征为吡啶环上 2,6 位被氯原子取代, 5 位含碘原子, 同时连接氰基官能团, 赋予其独特的反应活性和电子特性。该化合物在有机溶剂 (如二甲基亚砜、甲醇) 中具有中等溶解性, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为烟酸衍生物, 2,6-二氯-5-碘烟腈在医药和农药中间体合成中具有关键作用。其分子中的卤素原子 (Cl、I) 和氰基可参与亲核取代、偶联反应等, 是构建复杂杂环化合物的高效砌块。在生物活性研究中, 类似结构的卤代烟腈类化合物已显示出抗菌、抗肿瘤等潜在药理活性, 因此该产品在药物先导物开发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域:

医药中间体——用于合成抗病毒、抗肿瘤药物候选分子, 尤其是含碘杂环类化合物的关键前体。

农药研发——作为杀菌剂或杀虫剂的活性成分合成中间体。

材料科学——参与制备光电功能材料或配位聚合物。

具体实验中, 建议作为 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等反应的底物, 使用时需严格排除水分和氧气。

4. 储存条件与使用建议

储存于 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 的密闭容器中, 避光防潮, 建议充入惰性气体保护。开封后需在干燥环境下分装使用, 避免反复冻融。实验操作应在通风橱中进行, 佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。溶解时优先选用无水 DMF 或 THF, 溶液现配现用。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度>96%，核磁共振（¹H NMR、¹³C NMR）和质谱（MS）验证结构。

安全警示：对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性，可能引起过敏反应。接触后立即用大量清水冲洗，必要时就医。废弃物需按危险化学品规范处置。

（注：具体安全数据请参阅随货 MSDS 文件）