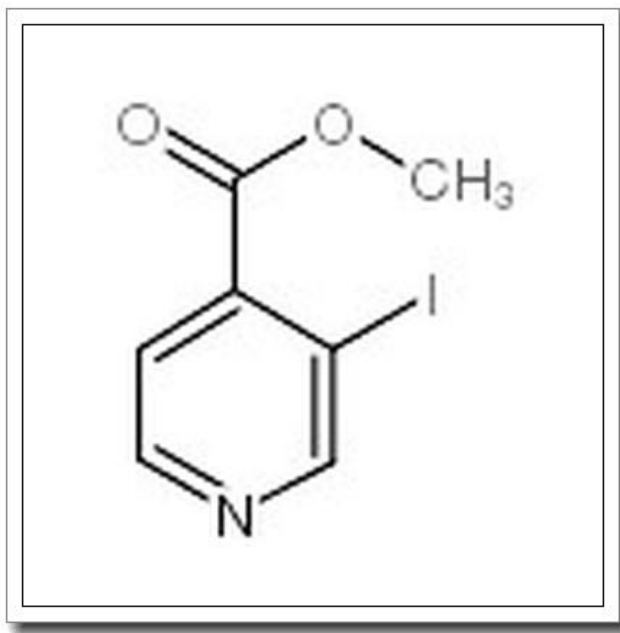


3-碘异烟酸甲酯

methyl 3-iodopyridine-4-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 3-iodopyridine-4-carboxylate
中文名称	3-碘异烟酸甲酯
CAS 号	188677-49-8
分子式	C ₇ H ₆ INO ₂
分子量	263.033
纯度	>96%

产品说明

3-碘异烟酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-碘异烟酸甲酯 (methyl 3-iodopyridine-4-carboxylate) 是一种重要的吡啶类衍生物，化学式为 $C_7H_6IN_2O_2$ ，分子量 263.033，CAS 登记号 188677-49-8。该化合物为白色至类白色结晶性粉末，纯度通常高于 96%。其结构特征为吡啶环 4 位上的羧酸甲酯基团与 3 位上的碘原子取代，这种独特结构使其在有机合成中表现出高反应活性，尤其在交叉偶联反应中可作为关键中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为杂环化合物，3-碘异烟酸甲酯的碘原子易被金属催化反应（如 Suzuki、Stille 偶联）取代，而酯基可进一步水解或转化，因此成为构建复杂分子骨架的重要模块。在药物化学领域，吡啶结构广泛存在于生物活性分子中，该化合物可用于合成抗肿瘤、抗感染及中枢神经系统药物的先导化合物。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于以下领域：

- 医药中间体：用于合成靶向激酶抑制剂或抗生素的吡啶类衍生物。
- 材料科学：作为配体参与金属有机框架（MOF）材料的制备。
- 农业化学：参与开发新型杀虫剂或除草剂的活性成分。
- 学术研究：在有机方法学中用于开发新型偶联反应或官能团转化策略。

4. 储存条件与使用建议

建议在避光、干燥条件下储存于 2-8° C 的密闭容器中，避免与强氧化剂接触。使用时需在惰性气体（如氮气）保护下操作，以减少可能的分解。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜（DMSO）、二氯甲烷等有机溶剂，水溶性较低。实验操作应在通风橱中进行，并佩戴防护手套及护目镜。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，同时提供核磁共振（NMR）和质谱（MS）数据以

确证结构。根据 GHS 分类，该化合物可能造成皮肤刺激（H315）和眼睛刺激（H319），使用时应遵守实验室化学品通用处置规范。如意外接触，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，建议通过专业化学品回收机构处理。

（注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件进一步验证。）