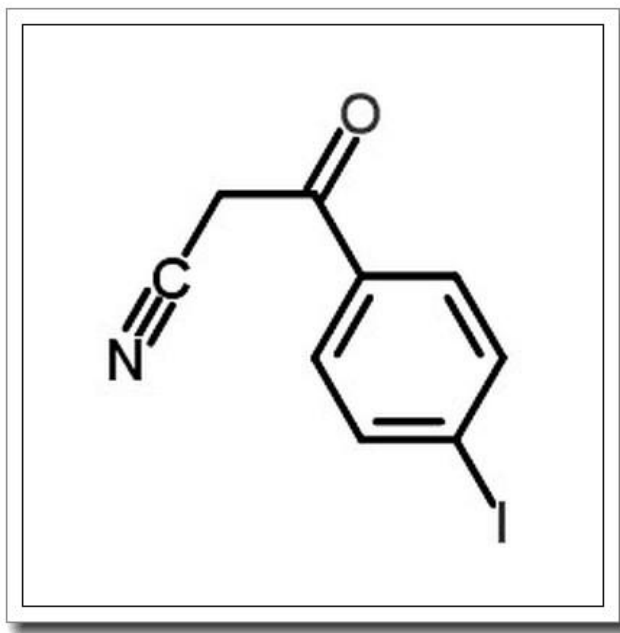


4-碘苯甲酰乙腈

3-(4-iodophenyl)-3-oxopropanenitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-(4-iodophenyl)-3-oxopropanenitrile
中文名称	4-碘苯甲酰乙腈
CAS 号	206346-33-0
分子式	C ₉ H ₆ I ₁ N ₁ O ₁
分子量	271.055
纯度	>96%

产品说明

3-(4-碘苯基)-3-氧代丙腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-(4-碘苯基)-3-氧代丙腈（化学名称：3-(4-iodophenyl)-3-oxopropanenitrile），中文别名 4-碘苯甲酰乙腈，是一种含碘芳香族有机化合物。其 CAS 号为 206346-33-0，分子式为 C₉H₆INO，分子量 271.055。该化合物为白色至淡黄色结晶粉末，纯度通常高于 96%，具有显著的羰基和腈基反应活性，可溶于常见有机溶剂如乙醇、二甲基亚砷（DMSO），微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物结构中的碘原子和活性官能团使其成为有机合成中的重要中间体，尤其在构建复杂杂环结构和药物分子中表现出关键作用。其碘取代基可通过偶联反应（如 Suzuki 偶联）进一步衍生化，而 β-酮腈结构则易于参与缩合、环化等反应，在医药和材料化学领域具有广泛的应用潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

3-(4-碘苯基)-3-氧代丙腈主要用于以下领域：

- 医药研发：作为合成抗肿瘤、抗炎或中枢神经系统药物的重要砌块。
- 材料科学：用于制备含碘功能材料或液晶分子前体。
- 化学研究：作为探针或标记物参与光化学反应机制研究。

4. 储存条件与使用建议

本品需避光密封保存于 2-8℃ 干燥环境中，长期储存建议充入惰性气体保护。使用时需在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明，推荐使用 DMSO 或丙酮配制母液，并注意现配现用以防止水解。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥ 96%，重金属残留符合 ACS 标准。安全数据表明，其急性毒性（LD₅₀）属中等危害类别，操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。若发

生泄漏，需用惰性吸附材料处理并按规定处置废弃物。详细安全信息请参阅随附的MSDS（材料安全数据表）。

注：本说明仅限专业研究人员参考，不可替代实际实验评估。使用前请充分查阅文献并评估适用性。