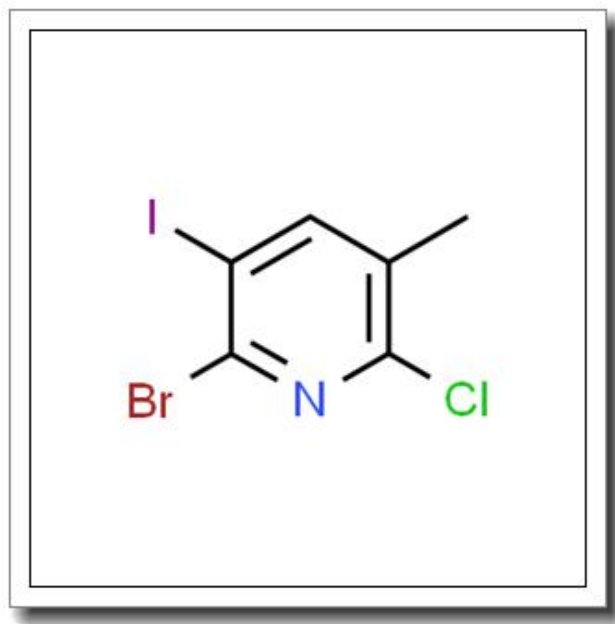


## 2-溴-6-氯-3-碘-5-甲基吡啶

*2-Bromo-6-chloro-3-iodo-5-methylpyridine*



### 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Bromo-6-chloro-3-iodo-5-methylpyridine
中文名称	2-溴-6-氯-3-碘-5-甲基吡啶
CAS 号	1822782-03-5
分子式	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> BrClIN
分子量	332.36
纯度	≥96%

## 产品说明

### 2-溴-6-氯-3-碘-5-甲基吡啶产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

2-溴-6-氯-3-碘-5-甲基吡啶 (CAS 号: 1822782-03-5) 是一种多卤代吡啶衍生物, 分子式为  $C_6H_4BrClIN$ , 分子量 332.36。该化合物为白色至淡黄色结晶性粉末, 纯度  $\geq 96\%$ , 具有显著的卤素取代基协同效应, 其结构中的溴、氯、碘原子赋予其高反应活性。吡啶环的甲基修饰进一步增强了其疏水性, 使其在有机溶剂中表现出良好的溶解性, 常见于二甲基亚砜 (DMSO)、二氯甲烷等极性溶剂体系。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为多卤代杂环化合物, 该分子是构建复杂药物中间体的关键骨架, 尤其在靶向激酶抑制剂的合成中具有不可替代性。碘原子的存在使其可通过偶联反应 (如 Suzuki、Sonogashira 反应) 高效引入芳基或炔基片段, 而溴和氯原子则为后续选择性官能团化提供了多位点修饰可能。其在药物化学领域的重要性体现在抗肿瘤、抗感染先导化合物的结构优化阶段。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药研发: 用于合成酪氨酸激酶抑制剂 (TKI) 的核心片段, 如非小细胞肺癌治疗药物的结构修饰。
- 3.2 材料科学: 作为有机电致发光材料 (OLED) 的前体, 调控电子传输层能级结构。
- 3.3 农药化学: 参与新型杀虫剂吡啶类衍生物的构效关系研究。
- 3.4 学术研究: 在金属催化 C-H 键活化反应中作为定向基团模板。

#### 4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存条件: 需避光密封保存于  $-20^{\circ}C$  惰性气体 (如氩气) 环境中, 长期储存建议分装至琥珀玻璃瓶。
- 4.2 溶解性测试: 使用前需通过薄层色谱 (TLC) 验证溶解均匀性, 推荐浓度为 10-50mM 的 DMSO 母液。

4.3 操作防护：应在通风橱中佩戴丁腈手套及护目镜操作，避免与还原性物质接触。

#### 5. 质量控制与安全信息

5.1 质检标准：通过 HPLC（反相 C18 柱，乙腈/水梯度洗脱）确保主峰面积  $\geq 96\%$ ，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。

5.2 安全数据：急性毒性（口服，大鼠） $LD_{50} > 500\text{mg/kg}$ ，皮肤刺激性类别 3。

5.3 应急处置：皮肤接触时立即用聚乙二醇 400 冲洗，眼部暴露需用生理盐水持续冲洗 15 分钟并就医。

本产品仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。使用者应具备有机化学实验资质并严格遵守当地危险化学品管理条例。