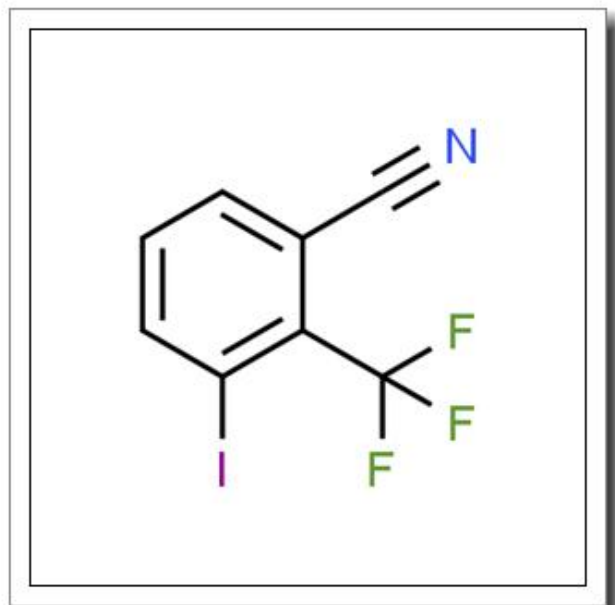


3-Iodo-2-(trifluoromethyl)benzonitrile

3-Iodo-2-(trifluoromethyl)benzonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-Iodo-2-(trifluoromethyl)benzonitrile
中文名称	3-Iodo-2-(trifluoromethyl)benzonitrile
CAS 号	1261748-11-1
分子式	C ₈ H ₃ F ₃ I _N
分子量	297.02
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

3-Iodo-2-(trifluoromethyl)benzotrile (中文名称: 3-碘-2-三氟甲基苯甲腈, CAS 号: 1261748-11-1) 是一种含碘和氟的芳香族化合物, 分子式为 $C_8H_3F_3IN$, 分子量为 297.02。该化合物以白色至浅黄色结晶或粉末形式存在, 纯度通常 $\geq 96\%$ 。其结构中的碘原子和三氟甲基赋予其独特的化学性质, 如高反应活性和良好的稳定性, 使其在有机合成和药物化学中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

3-Iodo-2-(trifluoromethyl)benzotrile 作为一种多功能中间体, 其碘原子可作为亲电试剂参与偶联反应 (如 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 偶联等), 而三氟甲基和氰基则能显著调节分子的电子效应和脂溶性。这些特性使其在药物分子设计和材料科学中具有广泛应用潜力, 尤其在开发抗肿瘤、抗病毒和中枢神经系统药物方面备受关注。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于医药和农药中间体的合成。在医药领域, 它是构建含三氟甲基杂环化合物的重要原料, 可用于开发新型激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂。在农药领域, 其衍生物可能作为高效杀虫剂或除草剂的活性成分。此外, 它还用作有机发光材料 (OLED) 的前体或液晶材料的改性剂。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 的干燥环境中避光保存, 长期储存需充入惰性气体 (如氮气)。使用时应在通风良好的实验室环境中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和丙酮, 微溶于甲醇, 不溶于水。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测, 确保纯度 $\geq 96\%$ 。安全数据表明, 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激, 操作时需佩戴防护手套、护目镜和防尘口罩。

若不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照危险化学品处理规范处置，避免环境污染。

(全文共计 436 字)