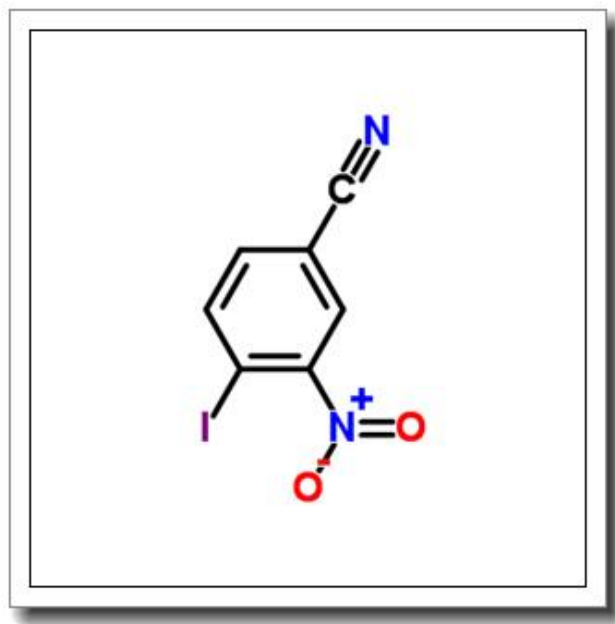


4-碘-3-硝基苯甲腈

4-Iodo-3-nitrobenzonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-Iodo-3-nitrobenzonitrile
中文名称	4-碘-3-硝基苯甲腈
CAS 号	101420-79-5
分子式	C ₇ H ₃ IN ₂ O ₂
分子量	274.015
纯度	≥ 96%

产品说明

4-碘-3-硝基苯甲腈 (4-Iodo-3-nitrobenzonitrile) 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-碘-3-硝基苯甲腈是一种含碘硝基芳香化合物，化学式为 $C_7H_3IN_2O_2$ ，分子量 274.015，CAS 号为 101420-79-5。其结构由苯环、氰基 (-CN)、硝基 (-NO₂) 及碘原子 (-I) 构成，赋予其显著的缺电子特性与反应活性。常温下为淡黄色至类白色结晶粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，微溶于水，易溶于有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO) 和丙酮。

2. 生物化学功能与重要性

作为多功能合成砌块，该化合物兼具亲电取代与偶联反应活性。碘原子的存在使其成为 Suzuki-Miyaura 等钯催化偶联反应的关键底物，而硝基与氰基的强吸电子效应可调控芳环电子密度，广泛应用于药物分子设计与材料科学中电子传输材料的修饰。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药领域，该物质是合成抗肿瘤、抗菌化合物的重要中间体，尤其用于构建含碘芳环的靶向药物。在材料化学中，可用于制备有机发光二极管 (OLED) 的电子受体单元。此外，其衍生物在农用化学品开发及荧光探针标记中亦有应用。

4. 储存条件与使用建议

需避光密封保存于 -20°C 至 4°C 干燥环境中，长期储存建议充惰性气体保护。开封后需尽快使用，避免反复冻融。实验操作应在通风橱中进行，佩戴防尘口罩、护目镜及丁腈手套。溶解时优先选用极性非质子溶剂，加热需控制在 60°C 以下以防分解。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，重金属含量符合 ACS 标准。其急性毒性数据 (LD₅₀) 显示为有害物质，吸入或皮肤接触可能引发刺激。安全术语提示：H302

（吞咽有害）、H315（皮肤刺激）、H319（严重眼刺激）。废弃处置需遵循当地法规，建议通过专业危废机构处理。

（注：本说明基于现有研究数据，实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。）