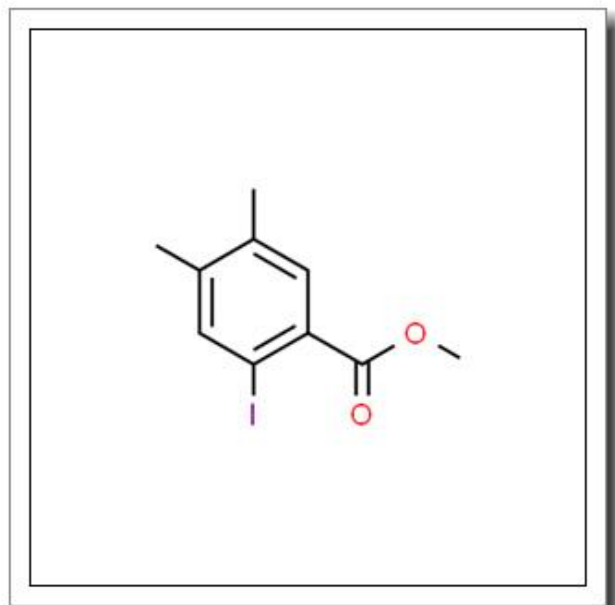


# Methyl 2-iodo-4,5-dimethylbenzoate

*Methyl 2-iodo-4,5-dimethylbenzoate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 2-iodo-4,5-dimethylbenzoate
中文名称	Methyl 2-iodo-4,5-dimethylbenzoate
CAS 号	1086391-91-4
分子式	C <sub>10</sub> H <sub>11</sub> I <sub>0</sub> O <sub>2</sub>
分子量	290.098
纯度	≥96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

Methyl 2-iodo-4,5-dimethylbenzoate (中文名称: 2-碘-4,5-二甲基苯甲酸甲酯) 是一种有机碘化合物, CAS 号为 1086391-91-4, 分子式为  $C_{10}H_{11}IO_2$ , 分子量为 290.098。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 纯度  $\geq 96\%$ , 具有典型的芳香酯类特性。其结构中的碘原子和甲基取代基使其在有机合成中表现出较高的反应活性, 尤其在偶联反应和官能团转化中具有重要价值。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为芳基碘化物, 该化合物在过渡金属催化反应 (如 Suzuki 偶联、Heck 反应) 中可作为关键中间体, 用于构建复杂芳环结构。其酯基和碘原子的协同作用使其在药物化学和材料科学中具有广泛应用潜力。此外, 4,5-二甲基的立体位阻效应可调节反应选择性, 在不对称合成中具有独特优势。

### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域:

1. 医药中间体: 用于合成抗肿瘤、抗炎等活性分子的芳基骨架。
2. 材料科学: 作为有机光电材料 (如 OLED、液晶材料) 的前体化合物。
3. 学术研究: 在金属有机化学、催化机理研究中作为模型底物。
4. 农用化学品: 参与合成具有生物活性的农药或植物生长调节剂。

### 4. 储存条件与使用建议

储存条件: 需避光、密封保存于  $-20^{\circ}C$  至  $4^{\circ}C$  的干燥环境中, 长期储存建议充入惰性气体 (如氮气)。开封后需尽快使用, 避免反复冻融。

使用建议:

1. 操作时需通风橱中进行, 佩戴防护手套和护目镜。
2. 溶解性测试表明易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 建议先用少量溶剂预溶解。
3. 用于偶联反应时, 建议与钯催化剂 (如  $Pd(PPh_3)_4$ ) 在无氧无水条件下反应。

## 5. 质量控制与安全信息

质量控制：通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，水分含量 $\leq 0.5\%$ ，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。

安全信息：

1. GHS 分类：皮肤刺激（Category 2）、眼睛刺激（Category 2A）。
2. 避免吸入粉尘，接触皮肤后立即用大量清水冲洗。
3. 废弃物处理需符合当地法规，建议通过专业化学品回收机构处置。
4. 安全数据表（SDS）可随货提供，包含详细毒理学数据和应急处理措施。

注：本产品仅供科研用途，不适用于医药、食品或家庭用途。使用者应具备专业化学知识并遵守实验室安全规范。