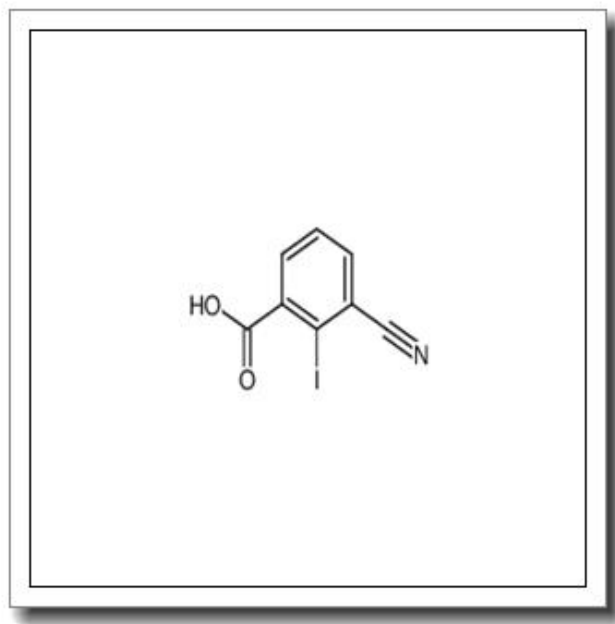


# 产品\_5756

*3-cyano-2-iodobenzoic acid*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	3-cyano-2-iodobenzoic acid
中文名称	产品_5756
CAS 号	106589-22-4
分子式	C <sub>8</sub> H <sub>4</sub> IN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	273.027
纯度	≥ 96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

3-氰基-2-碘苯甲酸 (3-cyano-2-iodobenzoic acid, CAS 号 106589-22-4) 是一种含碘芳香族羧酸衍生物, 分子式为  $C_8H_4IN_2O_2$ , 分子量 273.027。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在, 纯度  $\geq 96\%$ , 兼具氰基和碘原子的独特结构, 使其在有机合成中表现出高反应活性。其羧酸基团可参与成盐或酯化反应, 碘原子易发生亲核取代或偶联反应, 而氰基则可用于进一步官能团转化。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为多官能团砌块分子, 3-氰基-2-碘苯甲酸在药物化学和材料科学中具有重要价值。碘原子的存在使其成为 Suzuki-Miyaura 等交叉偶联反应的关键前体, 可用于构建复杂芳环体系。氰基的电子 withdrawing 特性可调节分子极性, 影响药物分子的代谢稳定性和膜渗透性。该化合物常被用于开发抗肿瘤、抗炎等小分子抑制剂的核心骨架。

### 3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本品主要用于构建靶向蛋白激酶的抑制剂分子, 如 EGFR、VEGFR 等酪氨酸激酶抑制剂的中间体。在材料科学中, 可作为液晶材料或有机光电材料的合成前体。此外, 在放射性药物化学中, 碘原子可被同位素置换用于示踪剂开发。实验室常用作有机合成教学中的多步反应演示试剂。

### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于  $2-8^{\circ}C$  避光干燥环境中, 长期储存需充惰性气体保护。开封后应在干燥箱中操作, 避免吸湿变质。使用时需佩戴防护手套、护目镜, 在通风橱中操作。溶解性测试表明, 本品易溶于 DMF、DMSO 等极性非质子溶剂, 微溶于甲醇, 难溶于水。反应投料前建议通过 TLC 或 HPLC 确认纯度。

### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 归一化法检测纯度, 批号相关 COA 可提供详细杂质谱。主要风险为刺激性, 接触皮肤或眼睛应立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。吸入粉尘可能

引起呼吸道刺激，操作时需佩戴 N95 口罩。废弃物应作为有害化学品处理，避免直接排放。运输分类为 UN 3077 9/PG III，需符合危险化学品运输规范。