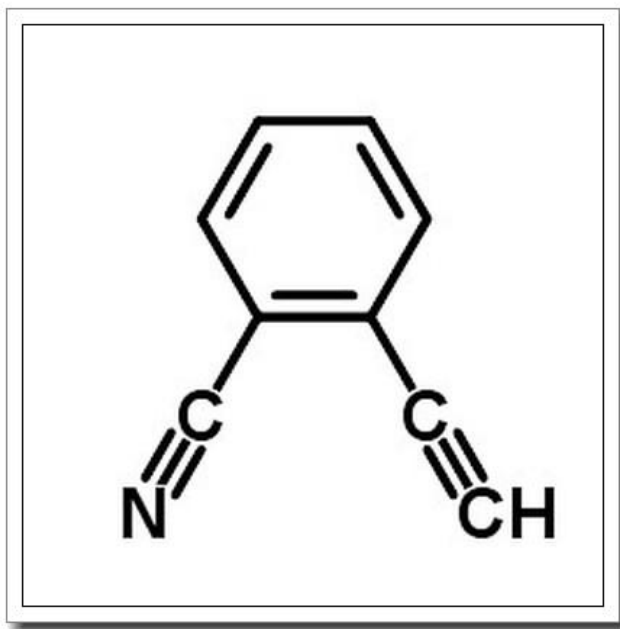


2-Ethynylbenzotrile

2-Ethynylbenzotrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Ethynylbenzotrile
中文名称	2-Ethynylbenzotrile
CAS 号	40888-26-4
分子式	C ₉ H ₅ N
分子量	127.143
纯度	>96%

产品说明

2-Ethynylbenzotrile 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-Ethynylbenzotrile (CAS 号: 40888-26-4) 是一种高纯度有机化合物, 分子式为 C_9H_5N , 分子量 127.143。该物质为白色至淡黄色结晶或粉末, 具有显著的芳香气味, 易溶于常见有机溶剂如乙醇、丙酮和二甲基亚砜 (DMSO)。其结构中包含乙炔基和氰基官能团, 赋予其独特的反应活性, 尤其在交叉偶联反应和环化反应中表现突出。产品纯度经 HPLC 验证大于 96%, 符合科研和工业应用标准。

2. 生物化学功能与重要性

2-Ethynylbenzotrile 作为关键中间体, 在药物化学和材料科学领域具有重要价值。其乙炔基可作为点击化学 (Click Chemistry) 的底物, 与叠氮化物发生环加成反应, 广泛应用于生物共轭和标记技术。氰基的存在进一步扩展了其在杂环化合物合成中的应用, 例如构建喹啉、异喹啉等药物核心骨架。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于以下领域:

- 医药研发: 作为激酶抑制剂、抗肿瘤药物及中枢神经系统药物的合成前体。
- 材料科学: 参与制备共轭聚合物或光电材料, 改善材料的光学与电学性能。
- 化学合成: 用于钯催化偶联反应 (如 Sonogashira 反应) 或作为多官能团砌块。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光密封保存, 长期储存需充入惰性气体 (如氮气) 以延缓氧化。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明, 推荐使用无水 DMSO 配制母液 (浓度 ≤ 10 mM), 现配现用以确保稳定性。

5. 质量控制与安全信息

产品经核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 双重验证, 确保结构准确。杂质含量严格控制在 4% 以下 (主要为同系物残留)。安全数据表明, 该化合物对眼睛和呼吸道有

刺激性（GHS 分类：H315-H319-H335），操作时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。废弃处理需遵循当地化学品管理法规。

本产品仅供科研用途，不适用于临床或食品领域。具体技术参数可随货提供分析证书（COA）。