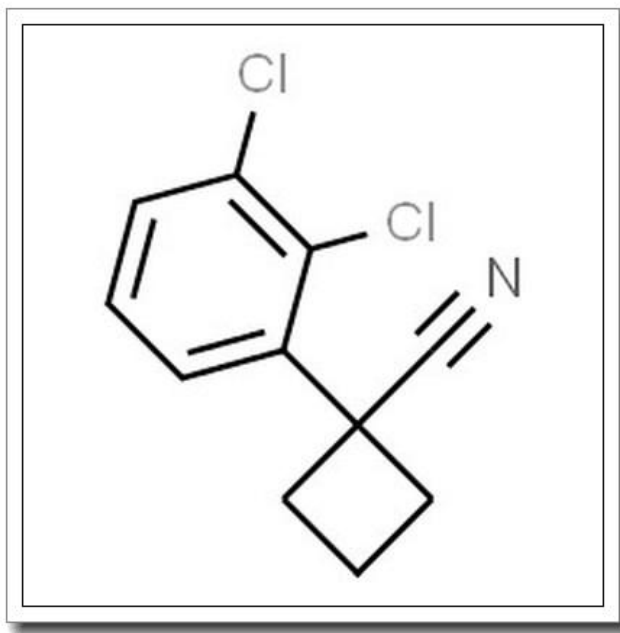


1-(2,3-二氯苯基)环丁烷甲腈

1-(2,3-dichlorophenyl)cyclobutanecarbonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-(2,3-dichlorophenyl)cyclobutanecarbonitrile
中文名称	1-(2,3-二氯苯基)环丁烷甲腈
CAS 号	1260653-34-6
分子式	C ₁₁ H ₉ Cl ₂ N
分子量	226.1
纯度	>96%

产品说明

1-(2,3-二氯苯基)环丁烷甲腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

1-(2,3-二氯苯基)环丁烷甲腈（化学名称：1-(2,3-dichlorophenyl)cyclobutanecarbonitrile）是一种有机合成中间体，CAS 号为 1260653-34-6，分子式为 $C_{11}H_9Cl_2N$ ，分子量为 226.1。该化合物为白色至类白色结晶性粉末，纯度高于 96%，具有典型的芳环和腈基特征结构，可通过红外光谱（IR）和核磁共振（NMR）进行结构确证。其疏水性和电子效应使其在特定反应中表现出高反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为关键合成砌块，其结构中的二氯苯基和环丁烷甲腈基团可参与亲核取代、环加成等反应，在药物化学中用于构建复杂杂环体系。其衍生物可能具有潜在的生物活性，如作为酶抑制剂或受体调节剂的前体，因此在先导化合物优化阶段具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发和有机合成领域。具体用途包括：1) 作为抗抑郁或抗炎药物分子的中间体；2) 用于构建含环丁烷骨架的活性化合物；3) 在材料科学中作为功能化单体的合成原料。实验显示其在 Suzuki 偶联等交叉偶联反应中表现良好。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光密封保存，长期储存需充惰性气体保护。使用时需在干燥环境下操作，避免接触强氧化剂或酸碱。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜（DMSO）和丙酮，微溶于水，配制溶液时建议预实验优化浓度。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，重金属残留 $< 10\text{ppm}$ 。安全数据表明其具有刺激性，操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。若不慎接触皮肤，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合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。具体应用需进一步验证其安全性和有效性。