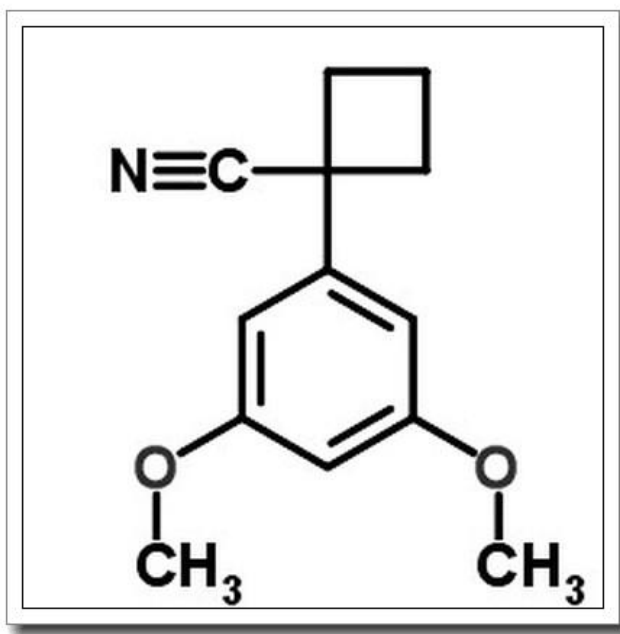


1-(3,5-Dimethoxyphenyl)cyclobutanecarbonitrile

1-(3,5-Dimethoxyphenyl)cyclobutanecarbonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-(3,5-Dimethoxyphenyl)cyclobutanecarbonitrile
中文名称	1-(3,5-Dimethoxyphenyl)cyclobutanecarbonitrile
CAS 号	339094-25-6
分子式	C ₁₃ H ₁₅ N ₂ O ₂
分子量	217.264
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-(3,5-Dimethoxyphenyl)cyclobutanecarbonitrile (CAS 号: 339094-25-6) 是一种有机化合物, 分子式为 $C_{13}H_{15}NO_2$, 分子量为 217.264。该化合物由环丁烷基团与 3,5-二甲氧基苯基及氰基官能团构成, 呈现白色至类白色结晶或粉末状。其纯度高于 96%, 具有较高的化学稳定性, 可溶于常见有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO, 但在水中溶解度较低。该结构中的氰基和芳香环使其成为有机合成中重要的中间体。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学研究中具有潜在的应用价值, 其结构中的二甲氧基苯环和氰基可能参与电子传递或作为酶抑制剂的活性位点。由于其独特的环丁烷骨架, 它在药物化学中常被用作构建块, 用于合成更复杂的分子, 尤其是具有生物活性的杂环化合物或受体配体。

3. 主要应用领域与具体用途

1-(3,5-Dimethoxyphenyl)cyclobutanecarbonitrile 主要用于医药研发和有机合成领域。在药物发现中, 它可作为关键中间体用于合成抗肿瘤、抗炎或中枢神经系统药物。此外, 在材料科学中, 该化合物可能用于制备功能性高分子或液晶材料。具体用途包括: 作为配体或底物参与过渡金属催化反应、构建环状化合物库、以及用于结构-活性关系 (SAR) 研究。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于干燥、避光的环境中, 储存温度范围为 2-8° C, 长期保存需充惰性气体 (如氮气) 保护。开封后应尽快使用, 避免反复冻融或暴露于潮湿空气。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解推荐使用无水有机溶剂, 并避免与强氧化剂或强酸接触。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度 $\geq 96\%$, 并提供相关分析证书 (COA)。其 CAS 号与结

构经核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 验证。安全信息显示, 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统有刺激性, 操作时应遵守 GHS 标准, 使用个人防护装备。如不慎接触, 立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。