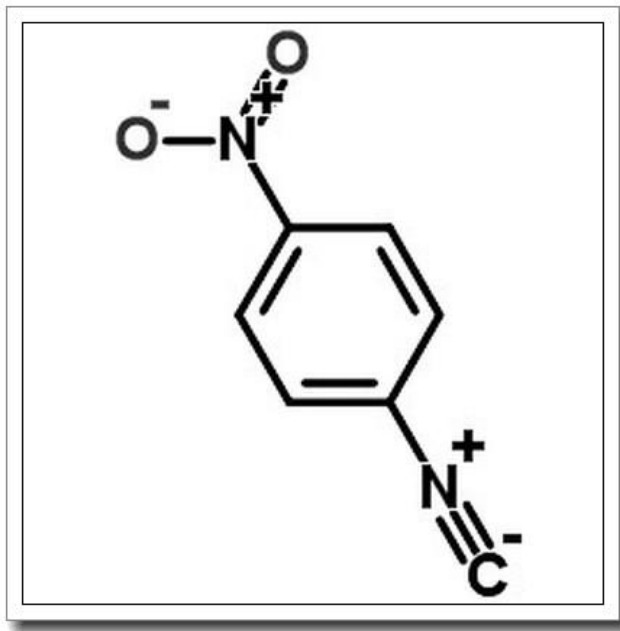


1-异氰基-4-硝基苯

1-Isocyano-4-nitrobenzene



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-Isocyano-4-nitrobenzene
中文名称	1-异氰基-4-硝基苯
CAS 号	1984-23-2
分子式	C ₇ H ₄ N ₂ O ₂
分子量	148.119
纯度	>96%

产品说明

1-异氰基-4-硝基苯产品说明书

产品概述与化学特性

1-异氰基-4-硝基苯 (1-Isocyno-4-nitrobenzene) 是一种重要的芳香族异氰化物, 化学式为 $C_7H_4N_2O_2$, 分子量 148.119, CAS 登录号 1984-23-2。该化合物为黄色至黄褐色结晶性粉末, 纯度大于 96%, 具有典型的异氰基 (-NC) 和硝基 (-NO₂) 官能团特征。其结构中同时存在的吸电子硝基和反应活性极高的异氰基, 使其成为有机合成中有价值的中间体。

生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学领域主要作为合成砌块使用。异氰基团可与多种亲核试剂发生加成反应, 而硝基的强吸电子效应能显著活化苯环上的取代反应。这种双重反应特性使其在杂环化合物合成、金属有机框架材料制备以及生物活性分子修饰中具有独特价值。其衍生物常见于药物研发中的先导化合物优化阶段。

主要应用领域与具体用途

1. 有机合成: 用于构建含氮杂环体系, 如吡啶、三唑类化合物
2. 材料化学: 作为配体参与过渡金属配合物的合成
3. 药物研发: 用于抗菌、抗肿瘤活性分子的结构修饰
4. 分析化学: 作为衍生化试剂用于特定官能团的标记与检测
5. 光电材料: 参与构建具有特殊光电性能分子器件

储存条件与使用建议

本品应避光保存于 2-8°C 干燥环境中, 使用前需恢复至室温并保持容器密闭。建议在惰性气体保护下操作, 避免接触水分和强氧化剂。实验操作应在通风良好的化学通风橱中进行, 佩戴适当的防护装备 (丁腈手套、防护眼镜及实验服)。开封后建议充氮保存并于 6 个月内使用完毕。

质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 >96%, 水分含量 <0.5%, 重金属残留 <10ppm。安全数据表明

该化合物具有刺激性，可能引起皮肤和眼睛损伤，操作时应避免吸入粉尘或接触皮肤。急性毒性 LD50（大鼠经口）为 320mg/kg，属于有害物质。废弃处理需遵照当地危险化学品处置规范，不可直接排入下水系统。