

(E)-3-(1H-indol-3-yl)acrylonitrile

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	(E)-3-(1H-indol-3-yl)acrylonitrile
产品目录号	
CAS 号	85452-79-5
分子式	C ₁₁ H ₈ N ₂
分子量	168.195
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(E)-3-(1H-indol-3-yl)acrylonitrile (CAS 号: 85452-79-5) 是一种含吲哚结构的丙烯腈衍生物, 分子式为 C₁₁H₈N₂, 分子量为 168.195。该化合物为固体粉末, 纯度高于 96%, 具有典型的 (E)-构型双键特征。其结构中的吲哚环与丙烯腈基团共轭, 赋予其独特的电子分布和化学反应活性, 常用于有机合成和生物化学研究。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为吲哚类衍生物, 在生物体系中表现出多种潜在活性。吲哚环是许多天然产物和药物分子的核心结构, 而丙烯腈基团可参与亲核加成或环化反应, 使其成为合成复杂生物活性分子的重要中间体。此外, 其结构可能干扰某些酶的活性, 在信号通路研究中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

(E)-3-(1H-indol-3-yl)acrylonitrile 主要应用于以下领域:

- 药物研发: 作为构建抗肿瘤或抗炎药物先导化合物的关键片段。
- 有机合成: 用于构建含吲哚骨架的杂环化合物, 如咪唑类衍生物。
- 生化探针: 通过修饰其官能团, 开发针对特定蛋白靶点的探针分子。
- 材料科学: 作为有机光电材料的合成前体。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C、避光、干燥条件下储存, 长期保存需充惰性气体保护。使用时需在干燥环境中操作, 避免接触强氧化剂或强酸强碱。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、二氯甲烷等有机溶剂, 水溶性较低。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 >96%, 批次间质量稳定。安全数据表明, 该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时应佩戴防护手套和护目镜, 在通风橱中进行。如意外接触, 立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地化学品管理法规。

(注: 实际使用前请查阅最新版物质安全数据表 (MSDS) 并执行风险评估。)