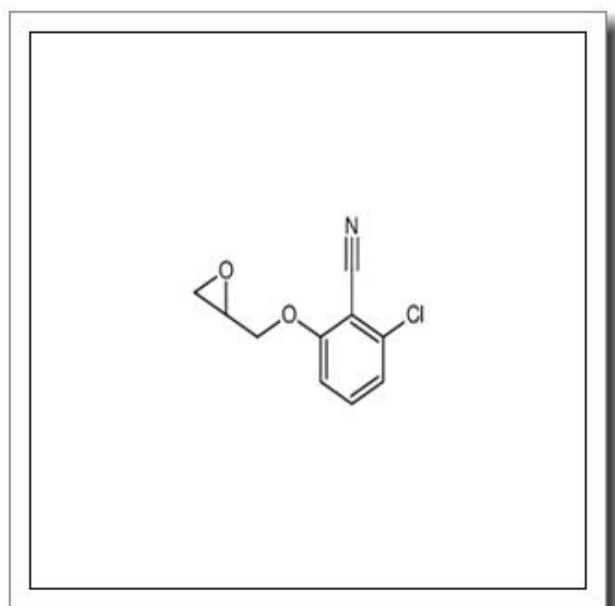


2-Chloro-6-[(2R)-2-oxiranylmethoxy]benzonitrile

2-Chloro-6-[(2R)-2-oxiranylmethoxy]benzonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Chloro-6-[(2R)-2-oxiranylmethoxy]benzonitrile
中文名称	2-Chloro-6-[(2R)-2-oxiranylmethoxy]benzonitrile
CAS 号	198226-53-8
分子式	C ₁₀ H ₈ ClN ₂ O ₂
分子量	209.629
纯度	≥ 96%

产品说明

2-氯-6-[(2R)-2-环氧乙烷基甲氧基]苯甲腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 2-Chloro-6-[(2R)-2-oxiranylmethoxy]benzonitrile, CAS 号为 198226-53-8, 是一种高纯度有机化合物。其分子式为 C₁₀H₈ClN₂O₂, 分子量为 209.629, 外观通常为白色至类白色结晶或粉末。该化合物含有氯代苯甲腈骨架和 (R)-构型的环氧乙烷基团, 赋予其独特的反应活性。纯度 ≥96% (HPLC 测定), 适合对立体选择性要求严格的合成应用。

2. 生物化学功能与重要性

作为手性环氧乙烷衍生物, 该分子可通过开环反应与亲核试剂 (如氨基、巯基) 选择性结合, 是构建 β-受体阻滞剂类药物的关键中间体。其苯甲腈结构可进一步转化为羧酸或酰胺, 扩展了在药物修饰中的应用价值。在不对称合成领域, R-构型环氧基团对生物活性分子的立体构型控制具有重要意义。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于以下领域:

- 3.1 医药研发: 作为 β-肾上腺素能受体拮抗剂 (如阿替洛尔类似物) 的合成前体。
- 3.2 农药化学: 用于构建具有除草或杀虫活性的含氮杂环化合物。
- 3.3 材料科学: 作为交联剂参与高分子材料的改性。
- 3.4 学术研究: 手性环氧开环反应的模型底物, 用于催化机理研究。

4. 储存条件与使用建议

储存条件: 需避光密封保存于 -20℃ 至 4℃ 干燥环境中, 长期存放建议充氮保护。

开封后需在干燥器内保存, 避免吸湿。

使用建议:

- 4.1 实验操作应在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

4.2 溶解性测试显示易溶于丙酮、二氯甲烷，微溶于乙醇，不溶于水。

4.3 环氧基团对酸敏感，反应体系需严格控制 pH 值。

5. 质量控制与安全信息

质量控制：通过 HPLC、NMR 和质谱进行批次一致性验证，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。

安全信息：

5.1 GHS 分类：皮肤致敏（Category 1B）、急性毒性（口服 Category 4）。

5.2 防护措施：佩戴护目镜、丁腈手套及防尘口罩，接触后立即用大量清水冲洗。

5.3 废弃物处理：按危险化学品规范处置，不可直接排入下水道。

本产品仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。具体安全数据请参阅随货提供的 MSDS 证书。