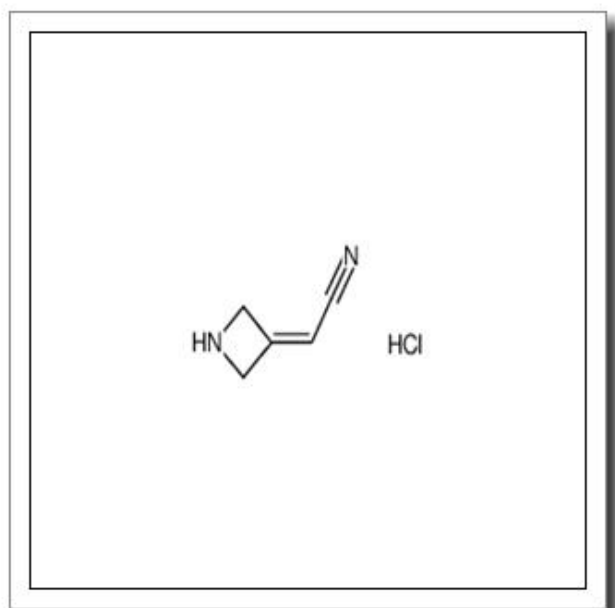


# 2-(azetidin-3-ylidene)acetonitrile hydrochloride

*2-(azetidin-3-ylidene)acetonitrile hydrochloride*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(azetidin-3-ylidene)acetonitrile hydrochloride
中文名称	2-(azetidin-3-ylidene)acetonitrile hydrochloride
CAS 号	1314910-43-4
分子式	C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> C <sub>1</sub> N <sub>2</sub>
分子量	130.575
纯度	≥96%

## 产品说明

### 2-(氮杂环丁-3-亚基)乙腈盐酸盐产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 2-(azetidin-3-ylidene)acetonitrile hydrochloride, CAS 号 1314910-43-4, 分子式 C<sub>5</sub>H<sub>7</sub>C<sub>1</sub>N<sub>2</sub>, 分子量 130.575, 纯度 ≥96%。外观为白色至类白色结晶性粉末, 易溶于极性有机溶剂 (如甲醇、DMSO), 微溶于水。其结构中的氮杂环丁烯骨架与氰基官能团赋予其独特的反应活性, 可作为有机合成中的关键中间体。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物通过氮杂环丁烯的张力环结构与亲电性氰基的协同作用, 表现出显著的生物活性潜力。其分子骨架常见于药物先导化合物设计中, 尤其作为 β-内酰胺类抗生素或神经递质调节剂的合成前体。在酶抑制研究中, 可通过迈克尔加成反应与靶蛋白的巯基结合, 可能影响细胞信号通路。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

3.1 医药研发: 用于构建含氮杂环的核心结构, 开发抗菌剂、抗肿瘤化合物及中枢神经系统药物。

3.2 材料科学: 作为功能化单体参与聚合物合成, 改善材料的热稳定性与机械性能。

3.3 农药化学: 修饰后可作为杀虫剂或除草剂的活性组分。

3.4 科研试剂: 在有机方法学研究中用于环加成反应或[3+2]环化反应模型。

#### 4. 储存条件与使用建议

4.1 储存: 密封保存于-20℃干燥环境中, 避免光照与湿气, 保质期 24 个月。

4.2 使用: 建议在惰性气体 (如氮气) 保护下操作, 溶解时优先选用无水 DMSO。工作浓度需通过预实验优化, 避免高浓度下发生聚合副反应。

#### 5. 质量控制与安全信息

5.1 质量控制: 通过 HPLC 检测纯度 ≥96%, 核磁共振 (1H NMR) 与质谱 (MS) 验证

结构一致性。

5.2 安全警示：对眼睛和皮肤有刺激性，操作时需佩戴护目镜与丁腈手套。若接触皮肤，立即用大量清水冲洗 15 分钟。

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。

注：本产品仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。具体应用前请查阅最新文献并评估合规性。