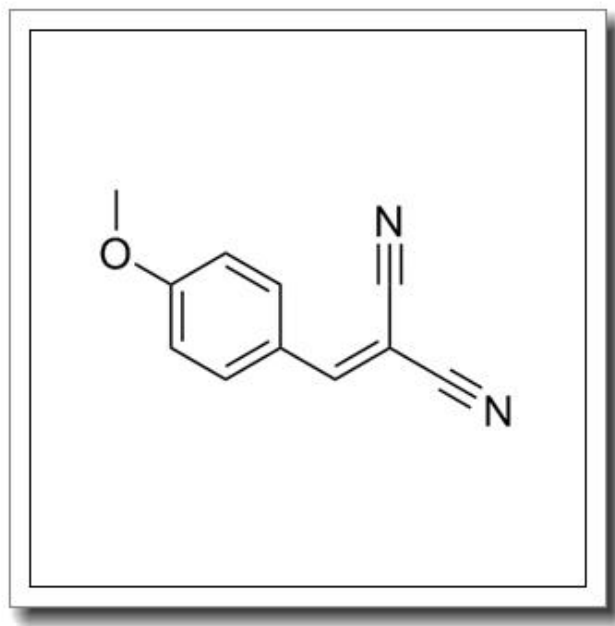


(4-甲氧基苄烯)丙二腈

2-[(4-methoxyphenyl)methylidene]propanedinitrile



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|--|
| 化学名称 | 2-[(4-methoxyphenyl)methylidene]propanedinitrile |
| 中文名称 | (4-甲氧基苄烯)丙二腈 |
| CAS 号 | 2826-26-8 |
| 分子式 | C11H8N2O |
| 分子量 | 184.194 |
| 纯度 | ≥96% |

产品说明

2-[(4-甲氧基苯基)亚甲基]丙二腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 2-[(4-methoxyphenyl)methylidene]propanedinitrile, 中文别名(4-甲氧基苄烯)丙二腈, CAS 号为 2826-26-8。其分子式为 C₁₁H₈N₂O, 分子量 184.194, 是一种淡黄色至黄色结晶粉末, 纯度≥96%。该化合物结构中含甲氧基苯基与丙二腈活性基团, 具有共轭双键特性, 在紫外-可见光区表现出特征吸收峰, 易溶于极性有机溶剂如 DMF、DMSO, 微溶于乙醇, 不溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为 α , β -不饱和二腈类衍生物, 该分子可通过迈克尔加成反应与生物大分子中的巯基或氨基结合, 在有机合成中作为关键中间体。其甲氧基的推电子效应可调节分子电子云密度, 增强反应选择性, 在光敏材料与药物分子设计中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

3.1 有机合成: 用于构建含苯并吡喃结构的杂环化合物, 是合成抗疟疾药物及抗肿瘤先导化合物的关键中间体。

3.2 材料科学: 作为电子受体单元参与制备有机半导体材料, 应用于 OLED 器件和光伏材料开发。

3.3 分析化学: 作为显色剂或荧光探针前体, 用于金属离子检测。

4. 储存条件与使用建议

4.1 储存条件: 需避光密封保存于干燥器中, 推荐温度 2-8°C, 相对湿度≤60%。

4.2 使用建议: 操作时佩戴防尘口罩及丁腈手套, 避免吸入粉尘或接触皮肤。溶解建议使用预脱水的 DMSO, 溶液现配现用。

5. 质量控制与安全信息

5.1 质量控制: 通过 HPLC 检测纯度, 批号关联 COA 报告, 含水分及残留溶剂检测数据。

5.2 安全信息: 属于刺激性化学品 (GHS 分类: 皮肤刺激类别 2), 若不慎接触眼睛需立即用生理盐水冲洗 15 分钟。废弃物处理应遵循当地危险化学品管理条例。

注: 本产品仅限科研用途, 不可用于临床或食品领域。具体实验方案建议参考文献: J. Org. Chem. 2015, 80, 4328-4334。