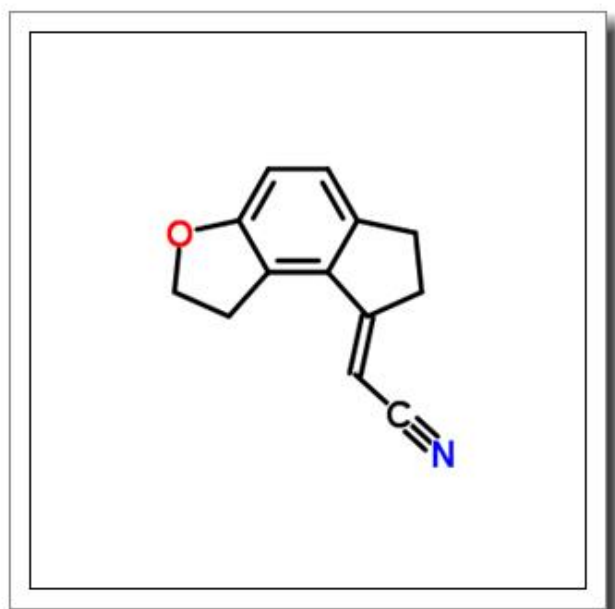


(E)-2-(1,2,6,7-四氢-8H-茚并[5,4-b]呋喃-8-亚基)乙腈

(2E)-2-(1,2,6,7-tetrahydrocyclopenta[e][1]benzofuran-8-ylidene)acetonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2E)-2-(1,2,6,7-tetrahydrocyclopenta[e][1]benzofuran-8-ylidene)acetonitrile
中文名称	(E)-2-(1,2,6,7-四氢-8H-茚并[5,4-b]呋喃-8-亚基)乙腈
CAS 号	196597-79-2
分子式	C ₁₃ H ₁₁ NO
分子量	197.232
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(2E)-2-(1, 2, 6, 7-tetrahydrocyclopenta[e][1]benzofuran-8-ylidene)acetonitrile (中文名: (E)-2-(1, 2, 6, 7-四氢-8H-茚并[5, 4-b]呋喃-8-亚基)乙腈) 是一种具有特定结构的有机化合物, CAS 号为 196597-79-2, 分子式为 C₁₃H₁₁N₀, 分子量为 197.232。该化合物以黄色至橙色结晶或粉末形式存在, 纯度通常不低于 96%。其化学结构中包含茚并呋喃骨架和乙腈基团, 这种独特的共轭体系使其在光化学和电子转移反应中表现出显著特性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为一种重要的中间体, 在生物化学领域具有广泛的应用潜力。其分子结构中的氰基和芳香杂环赋予其良好的电子亲和性, 可作为荧光探针或光敏剂的构建模块。此外, 其刚性骨架结构有助于稳定分子构象, 在药物化学中可用于设计靶向特定蛋白的小分子抑制剂。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 该化合物常用于构建抗肿瘤或抗炎药物的核心骨架。在材料科学中, 因其共轭特性, 可用于有机半导体材料的合成。此外, 它还作为关键中间体参与复杂天然产物的全合成, 例如某些具有生物活性的吲哚类或呋喃类衍生物。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于-20° C、避光、干燥的环境中保存, 长期储存需充入惰性气体保护。使用时应在通风良好的环境下操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和氯仿, 微溶于乙醇, 不溶于水。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 ≥96%, 批次间稳定性良好。安全数据表明, 其急性毒性属于中等危害类别 (GHS 分类: H302-H315-H319), 操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。废弃物处置应遵循当地化学品管理法规, 不可直接排入下水道。

注：具体实验方案需结合目标反应体系优化，建议用户通过预实验确定最佳投料比和反应条件。