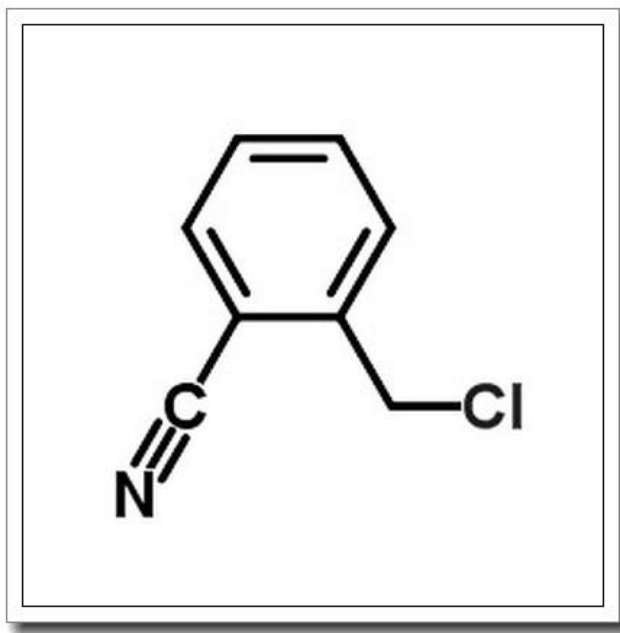


2-(氯甲基)苯腈

2-(Chloromethyl)benzotrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(Chloromethyl)benzotrile
中文名称	2-(氯甲基)苯腈
CAS 号	612-13-5
分子式	C ₈ H ₆ ClN
分子量	151.593
纯度	>96%

产品说明

2-(氯甲基)苯腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-(氯甲基)苯腈 (2-(Chloromethyl)benzotrile) 是一种有机合成中间体, 化学式为 C_8H_6ClN , 分子量 151.593, CAS 号为 612-13-5。本品为白色至淡黄色结晶或粉末, 纯度 >96%, 具有芳香气味。其结构中同时含有氰基 (-CN) 和氯甲基 (-CH₂Cl) 官能团, 赋予其较高的反应活性, 易参与亲核取代、缩合等反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯甲酸衍生物的关键合成前体, 2-(氯甲基)苯腈在药物化学中用于构建喹啉、异喹啉等杂环骨架。氯甲基的活泼性使其成为连接分子片段的桥梁, 而氰基可通过水解转化为羧酸或酰胺, 进一步扩展其在生物活性分子设计中的应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药、农药及材料科学领域。在医药研发中, 用于合成抗肿瘤、抗炎药物中间体; 在农药领域, 可作为杀菌剂或杀虫剂的合成原料; 在材料科学中, 用于制备液晶单体或高分子改性剂。此外, 其衍生物在荧光探针和金属配体合成中亦有重要用途。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 避光、防潮, 温度控制在 2-8°C。长期保存建议充入惰性气体 (如氮气)。使用时应穿戴防护手套、护目镜及防毒面具, 避免吸入粉尘或接触皮肤。操作环境需通风良好, 远离强氧化剂和酸碱。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度 >96%, 水分含量 <0.5%。安全数据表明, 其急性毒性 (LD₅₀ 大鼠口服) 为 500-1000 mg/kg, 对眼睛和皮肤有刺激性。泄漏处理需用惰性吸附材料收集, 并按危险废弃物处置。运输分类为 6.1 类有毒物质, UN 编号需参照当地法规。

注：以上信息基于实验室数据，实际应用前请进行小试验证。技术咨询请联系专业化学品供应商。