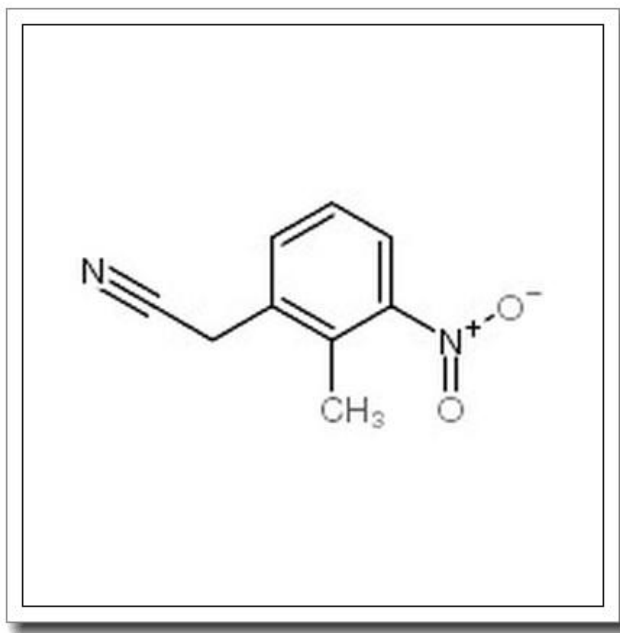


2-甲基-3-硝基苯乙腈

2-(2-methyl-3-nitrophenyl)acetonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(2-methyl-3-nitrophenyl)acetonitrile
中文名称	2-甲基-3-硝基苯乙腈
CAS 号	23876-14-4
分子式	C ₉ H ₈ N ₂ O ₂
分子量	176.172
纯度	>96%

产品说明

2-(2-甲基-3-硝基苯基)乙腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-(2-甲基-3-硝基苯基)乙腈 (化学名称: 2-(2-methyl-3-nitrophenyl)acetonitrile) 是一种有机芳香族化合物, CAS 号为 23876-14-4, 分子式 C₉H₈N₂O₂, 分子量 176.172。本品为淡黄色至类白色结晶或粉末, 纯度>96%, 具有典型的硝基芳香族化合物的化学性质, 包括一定的光敏感性和热稳定性。其结构中同时含有硝基和氰基官能团, 使其在有机合成中表现出独特的反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为重要的有机合成中间体, 其硝基和氰基官能团可参与多种亲核取代、还原和环化反应。在药物化学领域, 此类结构常用于构建杂环骨架或作为前体合成生物活性分子。其硝基在还原条件下可转化为氨基, 进一步拓展了其在功能分子设计中的应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于医药中间体、农药化学和材料科学领域。在医药研发中, 可用于合成喹啉类、吲哚类衍生物; 在农药领域, 可作为杀菌剂或杀虫剂的合成前体; 在功能材料方面, 可用于制备含氮配体或光电材料。具体用途包括但不限于: 抗肿瘤药物候选分子的结构修饰、农用化学品活性基团的引入等。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于阴凉干燥处, 避光条件下 2-8℃ 冷藏。长期储存需充惰性气体保护。使用前需恢复至室温并避免吸湿。操作时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩, 确保通风良好。溶解性测试表明易溶于二甲基亚砜、丙酮等有机溶剂, 水溶性较低。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度>96%, 残留溶剂符合 ICH 标准。MSDS 数据显示其急性毒性类别为 4 级 (低毒), 但可能对眼睛和皮肤产生刺激性。意外接触时需立即用大

量清水冲洗，必要时就医。废弃物处理应遵守当地化学品管理法规，禁止直接排入环境。

注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件进一步验证。