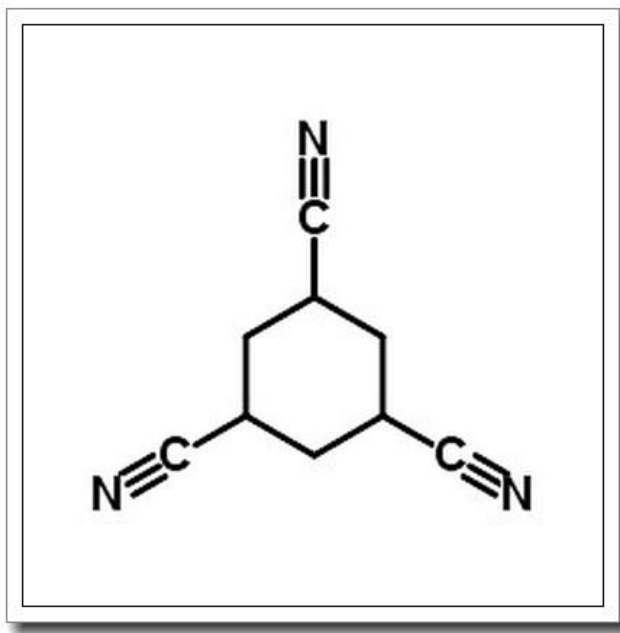


1,3,5-环己烷三腈

1, 3, 5-Cyclohexanetricarbonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	1, 3, 5-Cyclohexanetricarbonitrile
中文名称	1, 3, 5-环己烷三腈
CAS 号	183582-92-5
分子式	C ₉ H ₉ N ₃
分子量	159.188
纯度	>96%

产品说明

1, 3, 5-环己烷三腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

1, 3, 5-环己烷三腈（化学名称：1, 3, 5-Cyclohexanetricarbonitrile, CAS 号：183582-92-5）是一种对称环状三腈化合物，分子式为 C₉H₉N₃，分子量 159.188。其结构中三个氰基（-CN）均匀分布在环己烷骨架的 1, 3, 5 位，赋予其高极性及其反应活性。本品为白色至类白色结晶粉末，纯度 >96%，易溶于极性有机溶剂（如 DMF、DMSO），微溶于水。其稳定性良好，但在强酸/强碱条件下可能水解。

2. 生物化学功能与重要性

作为多官能团小分子，1, 3, 5-环己烷三腈可通过氰基的加成、缩合等反应参与杂环化合物合成，是构建三嗪类、嘧啶类衍生物的关键中间体。其刚性环状结构有助于分子定向组装，在药物化学中常用于骨架修饰，以调节化合物的脂溶性及生物利用度。

3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药研发：用于抗肿瘤、抗病毒药物先导化合物的设计，如三嗪类激酶抑制剂的合成。
- 3.2 材料科学：作为交联剂参与高分子材料制备，提升耐热性与机械强度。
- 3.3 农业化学：合成高效低毒农药的中间体，例如某些除草剂的氰基前体。
- 3.4 分析试剂：在色谱分离中作为极性修饰剂或标准品使用。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，避光、防潮，建议温度 2-8℃（长期）或室温（短期）。使用前需平衡至室温，避免吸入粉尘或接触皮肤。操作时需在通风橱中进行，佩戴防护手套及护目镜。溶解建议采用 DMF 或乙醇梯度稀释。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 >96%，残留溶剂符合 ICH 标准。MSDS 显示其急性毒性较低

(LD50 大鼠口服>2000 mg/kg)，但仍可能引起眼部/皮肤刺激。废弃处理需遵循危险化学品规范，避免与强氧化剂共存。

注：具体实验方案请结合文献优化，批量采购可提供定制化纯度及包装服务。