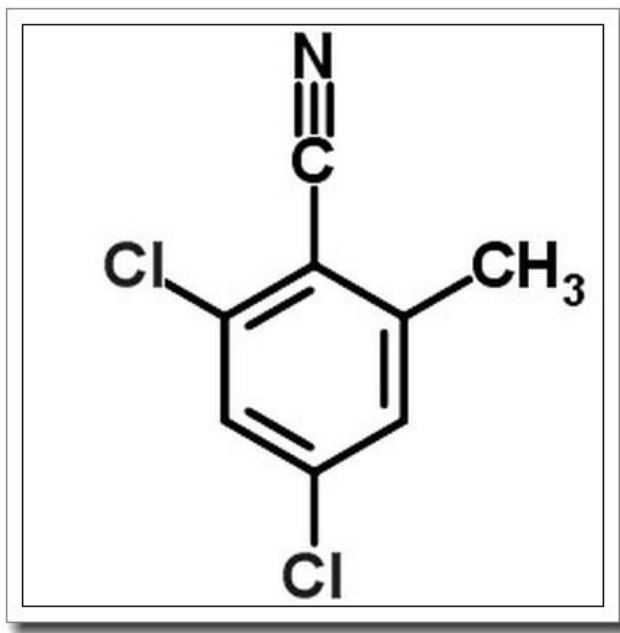


# 2,4-二氯-6-甲基苯甲腈

*2,4-Dichloro-6-methylbenzonitrile*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	2,4-Dichloro-6-methylbenzonitrile
中文名称	2,4-二氯-6-甲基苯甲腈
CAS 号	175277-98-2
分子式	C <sub>8</sub> H <sub>5</sub> Cl <sub>2</sub> N
分子量	186.038
纯度	>96%

## 产品说明

### 2,4-二氯-6-甲基苯甲腈产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

2,4-二氯-6-甲基苯甲腈 (2,4-Dichloro-6-methylbenzotrile) 是一种有机芳香化合物, 化学式为  $C_8H_5Cl_2N$ , 分子量 186.038, CAS 号为 175277-98-2。本品为白色至类白色结晶或粉末, 纯度高于 96%, 具有典型的芳腈类化合物的化学稳定性。其结构中包含苯环上的氯代和甲基取代基, 赋予其独特的电子效应和空间位阻特性, 使其在有机合成中表现出较高的反应选择性。

#### 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, 其苯甲腈骨架和卤代特性使其在药物化学和农药化学中具有广泛的应用潜力。氯代基团可参与亲核取代反应, 而氰基则能进一步转化为羧酸、酰胺等官能团, 为构建复杂分子结构提供关键合成节点。在生物活性分子设计中, 此类结构常作为药效团或骨架修饰单元, 影响化合物的脂溶性和靶标结合能力。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

2,4-二氯-6-甲基苯甲腈主要用于医药和农用化学品研发领域。在医药中间体合成中, 可用于构建抗肿瘤、抗菌药物的核心结构; 在农药领域, 可作为除草剂或杀菌剂的活性成分前体。此外, 在材料科学中, 其衍生物可用于液晶材料或高分子单体的制备。实验室中常作为芳环官能化研究的模型化合物。

#### 4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于阴凉干燥处, 推荐储存温度为 2-8°C, 避免光照和潮湿环境。开封后建议充惰性气体保护以延长稳定性。操作时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩, 在通风橱中进行称量和使用。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 微溶于水, 实际应用中需根据反应体系选择合适溶剂。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ , 残留溶剂符合 USP 标准。MSDS 数据显示其急性毒

性类别为 4 级（低毒），但可能对皮肤和眼睛产生轻微刺激。废弃物处置需遵守当地化学品管理法规，不可直接排入水体。运输时按一般化学品分类，需避免与强氧化剂混装。如发生泄漏，应采用吸附材料收集并移交专业处理机构。

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。