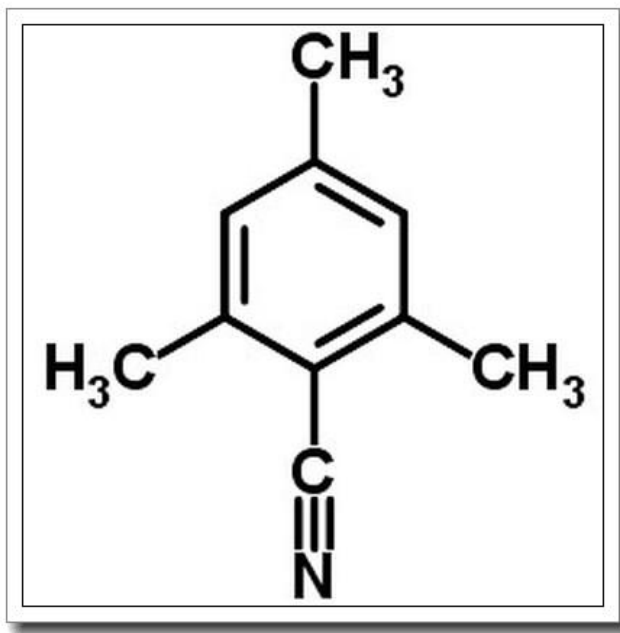


2,4,6-三甲基苯甲腈

2,4,6-trimethylbenzonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	2,4,6-trimethylbenzonitrile
中文名称	2,4,6-三甲基苯甲腈
CAS 号	2571-52-0
分子式	C ₁₀ H ₁₁ N
分子量	145.201
纯度	>96%

产品说明

2, 4, 6-三甲基苯甲腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2, 4, 6-三甲基苯甲腈 (2, 4, 6-Trimethylbenzotrile) 是一种芳香族腈类化合物, 化学式为 $C_{10}H_{11}N$, 分子量 145. 201。该化合物为无色至淡黄色液体或结晶固体, 具有特征性芳香气味。其 CAS 号为 2571-52-0, 纯度标准 >96%。结构上包含苯环上三个甲基 (2, 4, 6 位) 和一个氰基官能团, 赋予其独特的疏水性和电子效应, 使其在有机合成中作为重要中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为腈类衍生物, 2, 4, 6-三甲基苯甲腈可通过水解反应转化为相应的羧酸或酰胺, 也可参与金属催化偶联反应。其分子中的氰基具有高反应活性, 能与亲核试剂发生加成反应, 在药物化学中常用于构建杂环骨架。此外, 甲基的位阻效应可调控反应选择性, 在不对称合成和材料科学中具有潜在价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于医药、农药及功能材料领域。在医药研发中, 用作抗肿瘤或抗菌药物的合成前体; 在农药工业中, 可衍生为杀虫剂或除草剂的活性成分; 在材料科学中, 可作为液晶单体或高分子聚合物的改性剂。实验室中常用于研究芳香亲核取代反应机理或作为标准品用于分析方法开发。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于阴凉干燥处, 避免光照和潮湿环境, 长期储存温度应控制在 2-8°C。使用时应佩戴防护手套、护目镜及防毒面具, 操作区域需通风良好。避免与强氧化剂、强酸或强碱接触, 以防分解或剧烈反应。开封后建议充氮保护以延长稳定性。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 >96%, 并符合核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 的结构确证标准。安全数据表明, 该物质对眼睛和皮肤有刺激性, 吸入或食入可能造成呼吸道

和消化道损伤。应急处理需参照化学品泄漏预案，接触后立即用大量清水冲洗并就医。运输分类为危险化学品，需符合 UN 编号及 GHS 标签规范。

（注：实际使用前请查阅最新版物质安全数据表 MSDS 并遵守当地法规。）