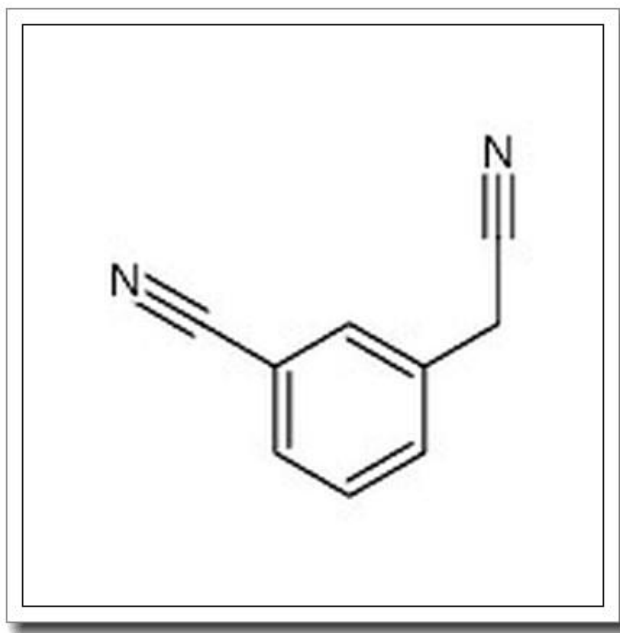


3-氰基苯乙腈

3-(Cyanomethyl)benzonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-(Cyanomethyl)benzonitrile
中文名称	3-氰基苯乙腈
CAS 号	16532-78-8
分子式	C ₉ H ₆ N ₂
分子量	142.157
纯度	>96%

产品说明

3-(Cyanomethyl)benzotrile 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-(Cyanomethyl)benzotrile (中文名: 3-氰基苯乙腈) 是一种有机氰化物, 化学式为 $C_9H_6N_2$, 分子量 142.157, CAS 号为 16532-78-8。本品为白色至淡黄色结晶或粉末, 纯度高于 96%, 具有芳香气味。其结构包含苯环与氰甲基的共轭体系, 赋予其较高的化学稳定性与反应活性, 易溶于极性有机溶剂如 DMF、DMSO, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氰基的芳香族化合物, 该分子在生物化学中常用于构建杂环骨架或作为酶抑制剂研究的中间体。氰基的高电子亲和性使其成为药物设计中常见的药效团, 尤其在激酶抑制剂和抗肿瘤药物开发中具有重要价值。其苯环结构可进一步修饰, 拓展其在生物活性分子合成中的应用。

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, 它是合成抗癫痫药物和抗炎化合物的关键中间体; 在农药领域, 可用于制备高效杀虫剂的氰基吡啶类衍生物; 此外, 在有机光电材料合成中, 可作为电子受体单元参与共轭聚合物构建。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、阴凉处 ($2-8^{\circ}C$), 避免光照与潮湿环境。开封后需充惰性气体保护以延长保质期。使用时应在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解推荐使用无水乙醇或乙腈, 反应体系中需严格控制水分含量以防分解。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 重金属含量符合 ACS 标准。安全数据表明, 其急性毒性 LD_{50} (大鼠经口) 为 320 mg/kg, 属于有害物质。操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩, 若接触皮肤应立即用大量清水冲洗。废弃物处置需遵循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, 具体应用需结合实验条件进一步验证。)