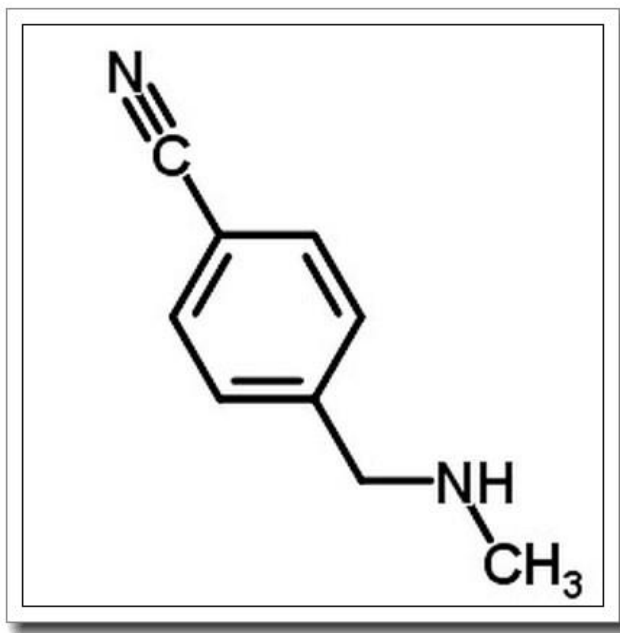


N-甲基-4-氰基苄胺

4-(Methylaminomethyl)benzonitrile



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|---|
| 化学名称 | 4-(Methylaminomethyl)benzonitrile |
| 中文名称 | N-甲基-4-氰基苄胺 |
| CAS 号 | 34403-48-0 |
| 分子式 | C ₉ H ₁₀ N ₂ |
| 分子量 | 146.189 |
| 纯度 | >96% |

产品说明

4-(Methylaminomethyl)benzotrile 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-(Methylaminomethyl)benzotrile (N-甲基-4-氰基苄胺) 是一种有机合成中间体, 化学式为 $C_9H_{10}N_2$, 分子量 146.189。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 常温下稳定, 易溶于极性有机溶剂如甲醇、乙醇和乙腈, 微溶于水。其结构中的氰基和甲基氨基官能团赋予其独特的反应活性, 可作为医药和精细化工领域的关键砌块。CAS 注册号为 34403-48-0, 纯度标准 $\geq 96\%$ (HPLC)。

2. 生物化学功能与重要性

作为苄胺类衍生物, 该化合物可通过氰基的转化反应参与杂环构建, 其甲基氨基侧链易发生烷基化或酰化修饰。在生物活性分子合成中, 常用于构建激酶抑制剂和神经递质调节剂的母核结构。其分子骨架的刚性特征有助于增强靶标结合特异性, 在药物先导化合物优化中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

医药研发领域: 用于合成抗肿瘤药物 (如蛋白激酶抑制剂) 和中枢神经系统药物中间体。

材料科学: 作为液晶材料或光电功能材料的合成前体。

农药化学: 参与新型杀虫剂和杀菌剂的分子设计。

实验室研究: 在有机方法学开发中作为氰基化反应的模型底物。

4. 储存条件与使用建议

储存条件: 密封保存于干燥惰性气体环境 (如氩气), 避光、防潮, 推荐温度 2-8°C。长期储存需置于阴凉通风处。

使用建议: 实验操作应在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。建议使用丁腈手套和护目镜。溶解时优先选用无水 DMF 或 THF 溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

质量控制: 通过 HPLC 检测纯度, GC-MS 验证结构, 水分含量 $\leq 0.5\%$ (Karl

Fischer 法)。

安全信息：属于刺激性化学品（GHS 分类：皮肤刺激类别 2），CAS 号 34403-48-0。

应急处理：皮肤接触后立即用大量清水冲洗 15 分钟，眼睛接触需用生理盐水冲洗并就医。废弃物应作为有害化学品处置，遵守当地环保法规。

（注：本说明基于当前研究数据编制，具体应用需结合实验验证。产品规格可能因批次调整，请以实际 COA 为准。）