

$\alpha, \alpha, \alpha', \alpha'$ -Tetramethyl-5-methyl-1,3-benzenediacetonitrile

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	$\alpha, \alpha, \alpha', \alpha'$ -Tetramethyl-5-methyl-1,3-benzenediacetonitrile
产品目录号	
CAS 号	120511-72-0
分子式	C ₁₅ H ₁₈ N ₂
分子量	226.317
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为 $\alpha, \alpha, \alpha', \alpha'$ -四甲基-5-甲基-1,3-苯二乙腈 (化学名称: $\alpha, \alpha, \alpha', \alpha'$ -Tetramethyl-5-methyl-1,3-benzenediacetonitrile), CAS 号为 120511-72-0, 分子式为 $C_{15}H_{18}N_2$, 分子量为 226.317。该化合物是一种高纯度有机腈类衍生物, 纯度 >96%, 常温下呈白色至类白色结晶或粉末状, 具有稳定的化学性质。其结构中的苯环与四甲基取代基赋予其独特的空间位阻效应, 使其在有机合成及材料科学中具有重要应用价值。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯二乙腈类化合物, 本品可通过氰基的活性参与多种亲核加成反应, 同时其四甲基结构可显著调控反应选择性。在生物化学研究中, 该类化合物常作为中间体用于合成具有生物活性的杂环化合物, 如药物分子或荧光探针的前体。其分子结构的刚性特征也为开发新型功能材料 (如液晶或高分子单体) 提供了化学基础。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药研发、有机合成及材料科学领域。在医药化学中, 可用于构建抗肿瘤或抗炎药物的核心骨架; 在有机合成中, 作为关键中间体参与 C-C 键偶联反应或环化反应; 在材料领域, 可作为配体或单体用于制备功能性聚合物。具体实验用途包括但不限于: 过渡金属催化反应的底物、光敏材料的合成原料、以及不对称合成的手性辅助剂。

4. 储存条件与使用建议

建议储存于 2-8°C 的干燥环境中, 避免光照与潮湿。长期保存需充入惰性气体 (如氮气) 密封。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明, 本品易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 难溶于水, 配制溶液时需根据实验需求选择适当溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 >96%, 符合科研级试剂标准。安全数据表明, 其急性毒性较

低（LD50 未明确），但仍需佩戴防护手套与护目镜操作。若接触皮肤，应立即用大量清水冲洗；若误入眼睛，需用生理盐水冲洗并就医。废弃物处理应遵循当地化学品管理法规，不可直接排放至环境中。

注：以上信息基于现有实验数据，具体应用需结合文献与方法学验证。建议使用者查阅最新版 MSDS 以获取完整安全信息。