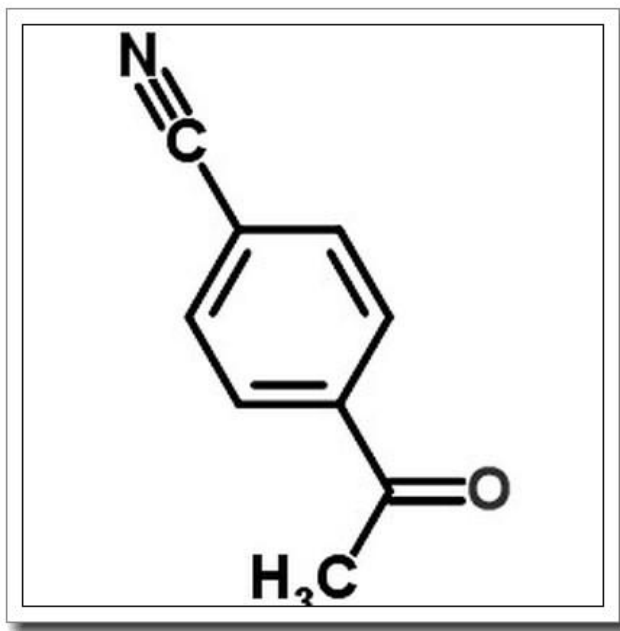


对氰基苯乙酮

4-Acetylbenzotrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-Acetylbenzotrile
中文名称	对氰基苯乙酮
CAS 号	1443-80-7
分子式	$\text{C}_9\text{H}_7\text{NO}$
分子量	145.158
纯度	>96%

产品说明

4-乙酰基苯甲腈 (4-Acetylbenzotrile) 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-乙酰基苯甲腈，化学名称为对氰基苯乙酮，CAS 号为 1443-80-7，分子式为 C_9H_7NO ，分子量为 145.158。本品为白色至淡黄色结晶粉末，纯度高于 96%，具有典型的芳香气味。其结构同时包含乙酰基和氰基官能团，使其兼具酮类和腈类化合物的化学特性，可溶于有机溶剂如乙醇、丙酮和氯仿，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在有机合成中作为关键中间体，其氰基和乙酰基的协同作用使其易于参与亲核加成、缩合反应及环化反应。在药物化学领域，它是合成杂环化合物（如吡啶、喹啉类衍生物）的重要前体，广泛应用于抗肿瘤、抗炎药物的研发。此外，其结构特性也适用于材料科学中高分子单体的设计。

3. 主要应用领域与具体用途

4-乙酰基苯甲腈主要用于医药中间体、农药合成及功能材料开发。在医药领域，用于合成镇痛剂和抗抑郁药物的活性成分；在农药工业中，可作为杀虫剂和除草剂的合成原料；在材料科学中，用于制备液晶材料和光敏聚合物。实验室中亦用作分析试剂或反应催化剂。

4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于阴凉干燥处，避免光照和潮湿环境，推荐储存温度为 2-8°C。使用时应穿戴防护手套、护目镜及实验服，确保通风良好。避免与强氧化剂、强酸或强碱接触，以防分解或副反应。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 $\geq 96\%$ ，并符合国际化学品标准（如 ACS 级）。安全数据表明，其急性毒性较低（LD50 大鼠口服 $> 2000 \text{ mg/kg}$ ），但可能对眼睛和皮肤产生轻微刺激。操作时需遵循 GHS 标准，标识代码为 H302（吞咽有害）和 H315（皮肤刺激）。废弃处置需按当地法规执行，不可直接排入环境。

注：以上信息基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件进一步验证。