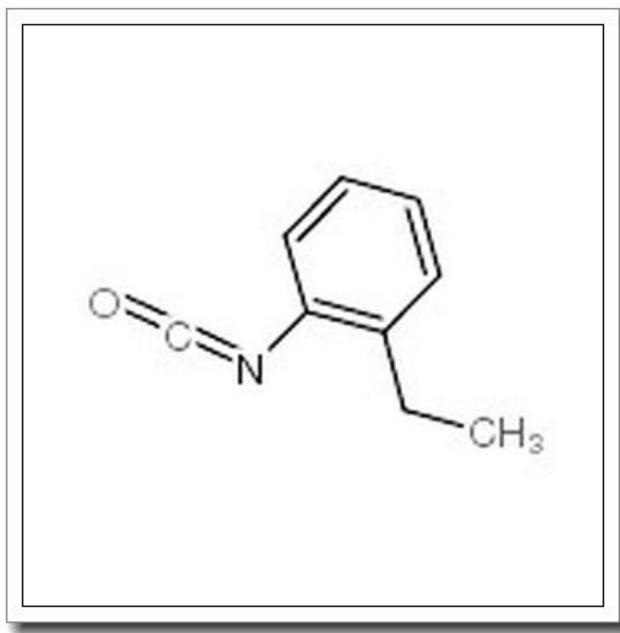


异氰酸 2-乙基苯酯

2-ethylphenyl isocyanate



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-ethylphenyl isocyanate
中文名称	异氰酸 2-乙基苯酯
CAS 号	40411-25-4
分子式	C ₉ H ₉ N ₀
分子量	147.174
纯度	>96%

产品说明

2-乙基苯基异氰酸酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-乙基苯基异氰酸酯 (2-Ethylphenyl isocyanate, CAS 40411-25-4) 是一种有机异氰酸酯类化合物, 分子式为 C_9H_9NO , 分子量 147.174。该化合物为无色至淡黄色液体, 具有典型异氰酸酯的刺激性气味, 密度约为 1.06 g/cm^3 (25°C), 沸点约 $210\text{-}212^\circ \text{C}$ 。其纯度标准 $>96\%$, 需严格避免与水分接触以防止水解反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为异氰酸酯衍生物, 其分子中的 $-N=C=O$ 官能团具有高反应活性, 可与羟基、氨基等亲核基团发生加成反应, 形成氨基甲酸酯或脲类结构。这一特性使其成为合成医药中间体、高分子材料交联剂的关键原料, 尤其在聚氨酯改性领域具有不可替代的作用。

3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药化学: 用于合成镇痛剂、抗肿瘤药物及酶抑制剂的核心骨架。
- 3.2 材料科学: 作为聚氨酯预聚体的改性剂, 可提升材料的耐候性与机械强度。
- 3.3 农药合成: 参与制备具有杀虫活性的氨基甲酸酯类化合物。
- 3.4 科研领域: 用于蛋白质标记或生物共轭实验中的活性位点修饰。

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存: 需充惰性气体 (如氮气) 密封保存于阴凉干燥处, 推荐温度 $2\text{-}8^\circ \text{C}$, 远离氧化剂与潮湿环境。
- 4.2 操作: 应在通风橱中使用, 佩戴防化手套、护目镜及防毒面具, 避免直接吸入蒸气或皮肤接触。
- 4.3 运输: 按危险化学品 B 类标准运输, 容器须标注“有毒”和“腐蚀性”标识。

5. 质量控制与安全信息

- 5.1 质检标准: 通过 HPLC 测定纯度, 水分含量 $\leq 0.1\%$, 游离酸值 $\leq 0.5\%$ 。
- 5.2 安全警示: 该物质对呼吸道、眼睛及皮肤有强刺激性, 接触后需立即用大量清

水冲洗 15 分钟并就医。

5.3 废弃物处理：未反应残余物需用乙醇/水（1:1）溶液淬灭后交由专业危废机构处理。

本产品仅限科研或工业用途，不适用于医药或食品相关应用。使用者应具备化学品操作资质并严格遵守 MSDS 规范。