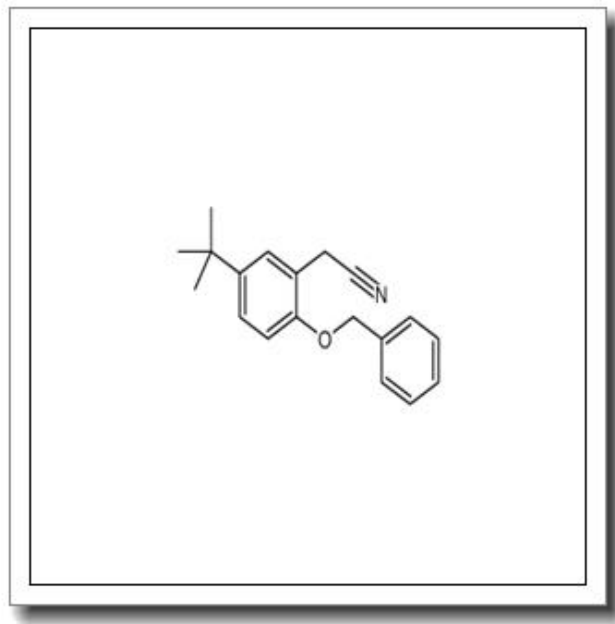


2-(2-(苄氧基)-5-(叔丁基)苯基)乙腈

2-(5-tert-butyl-2-phenylmethoxyphenyl)acetonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(5-tert-butyl-2-phenylmethoxyphenyl)acetonitrile
中文名称	2-(2-(苄氧基)-5-(叔丁基)苯基)乙腈
CAS 号	1246213-26-2
分子式	C ₁₉ H ₂₁ N
分子量	279.376
纯度	≥96%

产品说明

2-(5-叔丁基-2-苯甲氧基苯基)乙腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 2-(5-tert-butyl-2-phenylmethoxyphenyl)acetonitrile, 中文别名 2-(2-(苯氧基)-5-(叔丁基)苯基)乙腈, CAS 号 1246213-26-2, 分子式 C₁₉H₂₁N, 分子量 279.376。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 ≥96%, 具有芳烃特征性气味, 溶于常见有机溶剂如甲醇、乙醇和二甲基亚砜 (DMSO), 微溶于水。其结构中的氰基和苯甲氧基赋予其独特的反应活性, 适用于多种有机合成场景。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯基乙腈衍生物, 该化合物可通过氰基的极性参与亲核加成反应, 同时叔丁基和苯氧基的空间位阻效应可调控反应选择性。在药物化学中, 此类结构常作为关键中间体用于构建具有生物活性的杂环体系, 如喹啉类或苯并呋喃类化合物。其分子骨架对开发抗炎、抗肿瘤靶向药物具有潜在价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域:

- (1) 医药研发: 作为小分子抑制剂或受体调节剂的合成前体;
- (2) 材料科学: 用于制备液晶材料或光电功能分子的中间体;
- (3) 农业化学: 参与新型杀虫剂或植物生长调节剂的合成。

具体实验中可用于 Suzuki 偶联、亲电芳香取代等反应, 或通过氰基水解转化为羧酸衍生物。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、避光环境中, 长期储存温度需控制在 2-8℃。开封后需充惰性气体保护以避免吸湿或氧化。使用时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩, 在通风橱中操作。溶解时优先选用无水溶剂, 若需水相反应建议加入相转移催化剂。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，残留溶剂符合 USP 标准。MSDS 显示其急性毒性类别为 4 级（低毒），但接触皮肤或眼睛可能引起轻微刺激。意外吸入粉尘应立即转移至空气新鲜处，接触后需用大量清水冲洗至少 15 分钟。废弃物处置需遵循当地化学品管理法规，禁止直接排放至自然环境。

注：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合用户工艺验证。技术参数可能因批次略有差异，请以随货质检报告为准。