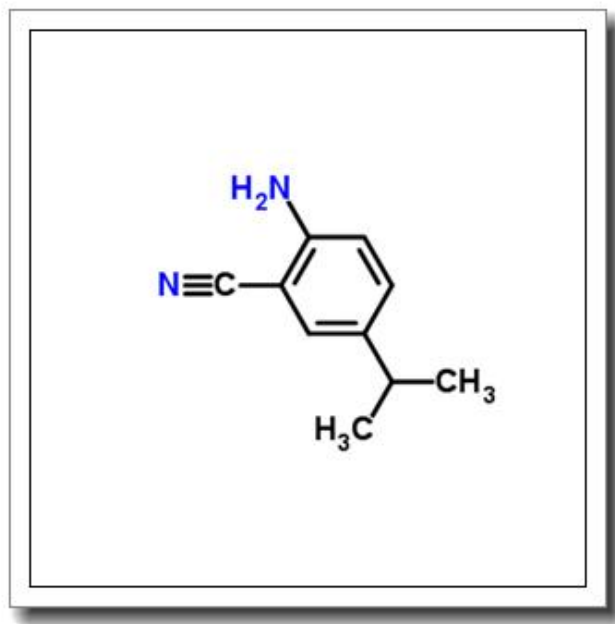


## 2-氨基-5-(1-甲基乙基)苯腈

*2-Amino-5-isopropylbenzonitrile*



### 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Amino-5-isopropylbenzonitrile
中文名称	2-氨基-5-(1-甲基乙基)苯腈
CAS 号	549488-76-8
分子式	C <sub>10</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub>
分子量	160.216
纯度	≥ 96%

## 产品说明

### 2-氨基-5-(1-甲基乙基)苯腈产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

2-氨基-5-(1-甲基乙基)苯腈 (2-Amino-5-isopropylbenzotrile) 是一种有机芳香化合物, 化学式为  $C_{10}H_{12}N_2$ , 分子量为 160.216。该化合物为白色至淡黄色结晶粉末, CAS 号为 549488-76-8, 纯度  $\geq 96\%$ 。其结构包含苯环上的氨基 ( $-NH_2$ ) 和腈基 ( $-CN$ ) 官能团, 以及异丙基 ( $-CH(CH_3)_2$ ) 取代基, 赋予其独特的极性和反应活性。该化合物可溶于常见有机溶剂如甲醇、乙醇和乙醚, 微溶于水。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为苯胺类衍生物, 该化合物在有机合成中表现出显著的中间体特性。氨基和腈基的共存使其成为构建杂环化合物 (如吲哚、喹啉等) 的关键前体。其分子结构中的电子效应和空间位阻特性, 使其在药物化学中常用于修饰生物活性分子的药效团, 尤其在抗肿瘤和抗菌化合物的研发中具有潜在价值。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于医药、农药及材料科学领域。在医药研发中, 它可作为合成酪氨酸激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂的中间体。在农药领域, 用于制备具有除草或杀虫活性的苯甲酰胺类衍生物。此外, 在功能材料领域, 其腈基可通过聚合或交联反应参与高分子材料的合成。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议密封储存于干燥、避光的环境中, 温度控制在  $2-8^{\circ}C$ , 长期保存需充惰性气体保护。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, 推荐使用极性有机溶剂 (如 DMF 或 DMSO) 以提高溶解效率。开封后建议一次性使用完毕, 或严格隔绝湿气。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ , 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据表 (SDS) 显示其急性毒性类别为 4 ( $LD_{50} > 2000 \text{ mg/kg}$ ), 但仍需佩戴防护手套和

护目镜。废弃物处理应遵循当地法规，不可直接排入下水道。如发生泄漏，需用惰性吸附材料收集并交由专业机构处置。

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。