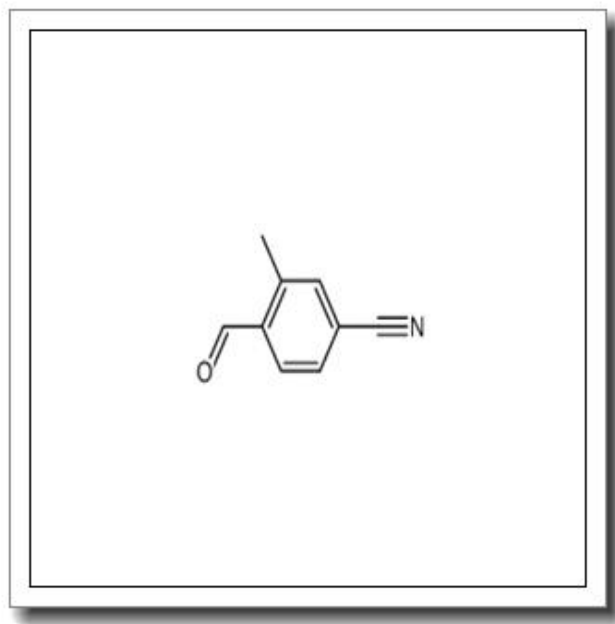


# 4-甲酰基-3-甲基苯腈

*4-formyl-3-methyl-benzonitrile*



## 产品基本信息

| 属性    | 值  |
|-------|--|
| 化学名称  | 4-formyl-3-methyl-benzonitrile               |
| 中文名称  | 4-甲酰基-3-甲基苯腈                                 |
| CAS 号 | 27609-91-2                                   |
| 分子式   | C <sub>9</sub> H <sub>7</sub> N <sub>0</sub> |
| 分子量   | 145.158                                      |
| 纯度    | ≥ 96%  |

## 产品说明

### 4-甲酰基-3-甲基苯腈产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

4-甲酰基-3-甲基苯腈 (4-formyl-3-methyl-benzonitrile, CAS 号: 27609-91-2) 是一种有机芳香化合物, 分子式为  $C_9H_7NO$ , 分子量为 145.158。该化合物为白色至淡黄色结晶或粉末, 纯度  $\geq 96\%$ , 兼具腈基和甲酰基两种官能团, 使其具有较高的反应活性。其化学结构中苯环上的甲基和甲酰基取代位点为其提供了独特的电子效应和空间位阻, 适合作为中间体参与多种有机合成反应。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为重要的医药和农药中间体, 4-甲酰基-3-甲基苯腈在构建杂环化合物 (如吡啶、喹啉类衍生物) 中具有关键作用。其甲酰基可通过缩合反应引入醛基活性位点, 而腈基则可进一步水解为羧酸或还原为胺基, 为药物分子设计提供灵活的结构修饰可能。在生物活性分子合成中, 该化合物常用于靶向酶抑制剂或受体调节剂的开发。

#### 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, 它是合成抗肿瘤、抗炎药物的重要砌块; 在农药领域, 可用于制备高效杀虫剂或除草剂的中间体; 在材料科学中, 可作为液晶材料或高分子单体的前体。此外, 其衍生物在荧光探针和配体化学中也有潜在应用价值。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、阴凉处 ( $2-8^{\circ}C$ ), 避免光照和潮湿环境。开封后需充惰性气体 (如氮气) 保护以延长稳定性。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, 该化合物易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和丙酮, 微溶于水, 推荐使用极性有机溶剂进行实验配制。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ , 并提供 COA (质量分析证书)。安全数据表明, 其

急性毒性 (LD50) 为中等, 操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。若接触皮肤, 应立即用大量清水冲洗; 如不慎吸入, 需转移至空气新鲜处。废弃物处理需符合当地环保法规, 建议通过专业化学废物回收机构处置。

(注: 以上信息基于现有实验数据, 具体应用需进一步验证。建议用户根据实际需求进行小试优化。)