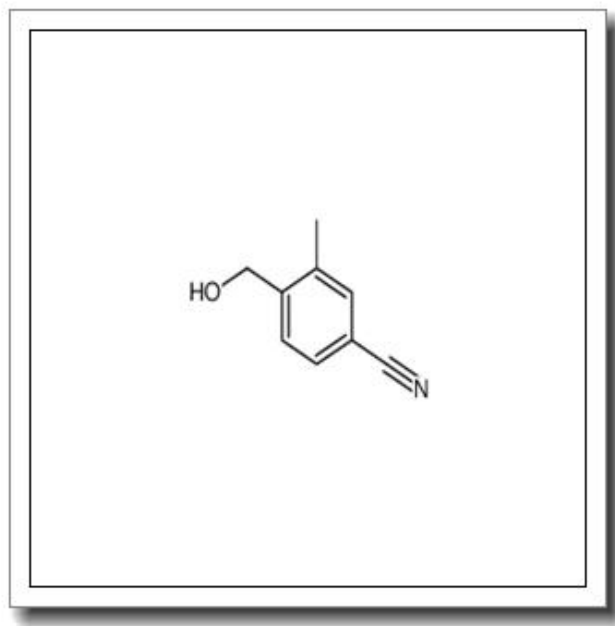


4-(羟基甲基)-3-甲基苯甲腈

4-(hydroxymethyl)-3-methylbenzonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-(hydroxymethyl)-3-methylbenzonitrile
中文名称	4-(羟基甲基)-3-甲基苯甲腈
CAS 号	227094-07-7
分子式	C ₉ H ₉ N ₁ O
分子量	147.174
纯度	≥96%

产品说明

4-(羟基甲基)-3-甲基苯甲腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-(羟基甲基)-3-甲基苯甲腈（化学名称：4-(hydroxymethyl)-3-methylbenzotrile）是一种有机化合物，分子式为 C₉H₉N₀，分子量为 147.174。其 CAS 号为 227094-07-7，纯度通常不低于 96%。该化合物为白色至类白色结晶或粉末，具有苯甲腈的基本结构，同时在苯环上带有羟基甲基和甲基取代基，使其兼具极性和反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为一种多功能中间体，4-(羟基甲基)-3-甲基苯甲腈在有机合成和药物化学中具有重要价值。其羟基甲基和氰基官能团使其易于参与缩合、酯化、氧化等多种反应，常用于构建复杂分子骨架。在生物活性分子设计中，该化合物可作为关键片段用于合成具有抗菌、抗炎或抗肿瘤活性的先导化合物。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药、农药和材料科学领域。在医药研发中，它是合成某些激酶抑制剂和神经递质调节剂的重要中间体。在农药领域，可用于制备高效低毒的杀菌剂或杀虫剂。此外，其衍生物还可用于液晶材料或高分子单体的合成。

4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光条件下储存，温度控制在 2-8℃，避免与强氧化剂或强酸接触。开封后需充入惰性气体保护，以延长保存期限。使用时应在通风良好的环境中操作，避免直接吸入粉尘或接触皮肤。溶解性测试表明，该化合物易溶于甲醇、乙醇等极性有机溶剂，可根据实验需求选择合适的溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测，纯度 ≥96%，水分含量控制在 0.5% 以下。安全数据表明，其急性毒性为中等（LD₅₀ 大鼠经口约 500mg/kg），操作时需佩戴防护手套、护目

镜和防尘口罩。如不慎接触眼睛或皮肤，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地化学品管理法规，建议通过专业危废处理机构回收。

（注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件进一步验证。）