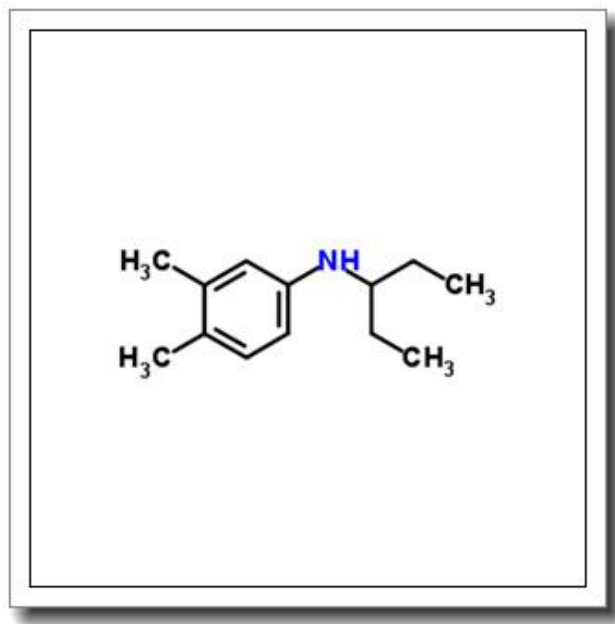


N-(1-乙基丙基)-3,4-二甲基苯胺

3,4-dimethyl-N-pentan-3-ylaniline



产品基本信息

属性	值
化学名称	3,4-dimethyl-N-pentan-3-ylaniline
中文名称	N-(1-乙基丙基)-3,4-二甲基苯胺
CAS 号	56038-89-2
分子式	C ₁₃ H ₂₁ N
分子量	191.313
纯度	≥ 96%

产品说明

3,4-二甲基-N-戊烷-3-基苯胺产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3,4-二甲基-N-戊烷-3-基苯胺（化学名称：3,4-dimethyl-N-pentan-3-yl aniline）是一种有机胺类化合物，CAS 号为 56038-89-2，分子式为 C₁₃H₂₁N，分子量为 191.313。本品为无色至淡黄色液体，纯度≥96%，具有典型的芳香胺气味。其结构中的苯环 3,4 位甲基取代及戊烷-3-基胺侧链赋予其独特的疏水性和空间位阻效应，适合作为有机合成中间体或配体使用。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物可作为手性胺类催化剂或配体参与不对称合成反应，尤其在构建碳-氮键的催化体系中表现优异。其分子结构中的仲胺基团能够与金属离子（如钯、铜等）形成配位键，在过渡金属催化反应中起关键作用。此外，苯环上的甲基取代基可调节电子云密度，影响反应活性和选择性，因此在复杂药物分子或功能材料的合成中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药中间体、农药活性成分及功能材料的合成。在医药领域，可用于构建喹啉类或吲哚类生物碱骨架；在农药化学中，可作为除草剂或杀菌剂的合成前体；在材料科学中，可用于制备液晶分子或光电材料的功能性单体。具体应用需结合实验设计，推荐用量为反应摩尔比的 1.1-1.5 倍。

4. 储存条件与使用建议

储存于惰性气体（如氮气）保护的密闭容器中，避光保存于 2-8℃ 环境，远离氧化剂和强酸。开封后建议一次性使用完毕，若需分次使用，需严格隔绝空气和水分。操作时佩戴防化手套、护目镜及防毒面具，避免吸入蒸气或接触皮肤。

5. 质量控制与安全信息

本品通过 HPLC 检测纯度≥96%，水分含量≤0.5%，重金属残留符合 ACS 标准。安全数据表明，其急性毒性（LD₅₀ 大鼠经口）为 1200 mg/kg，属于低毒类物质，但长

期接触可能造成皮肤敏感。泄漏处理需用惰性吸附材料（如硅藻土）覆盖，废液按危险有机胺类废弃物处置。

注：本说明仅限专业研究人员参考，具体实验方案需结合文献与安全规范执行。