

# 3-Cyanobenzenepropanoic acid

---

产品图片未找到

## 产品基本信息

属性	值
化学名称	3-Cyanobenzenepropanoic acid
产品目录号	
CAS 号	42287-97-8
分子式	C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	175.184
纯度	>96%

## 产品说明

### 3-氰基苯丙酸产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

3-氰基苯丙酸 (3-Cyanobenzenepropanoic acid) 是一种有机化合物，化学式为  $C_{10}H_9NO_2$ ，分子量为 175.184，CAS 号为 42287-97-8。本品为白色至类白色结晶性粉末，纯度高于 96%。其结构中包含苯环、氰基和羧酸基团，使其兼具芳香性和极性，可溶于多种有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO，微溶于水。该化合物在常温下稳定，但需避免强氧化剂和高温环境。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为苯丙酸衍生物，3-氰基苯丙酸的氰基和羧酸基团赋予其独特的反应活性，可作为有机合成中间体参与缩合、酯化和酰胺化反应。其结构特征使其在药物化学中具有潜在应用价值，例如作为非甾体抗炎药或抗菌剂的合成前体。此外，氰基的强吸电子效应可调节分子电子分布，影响其与生物靶标的相互作用。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发和精细化工领域。在药物合成中，可用于构建活性分子骨架或作为手性拆分中间体。在材料科学中，可作为液晶单体或高分子材料的改性单元。具体应用包括但不限于：抗肿瘤药物先导化合物优化、酶抑制剂设计以及功能化聚合物的制备。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、阴凉处 (2-8°C)，避免光照和潮湿环境。长期储存需充入惰性气体保护。使用前需恢复至室温并充分干燥。实验操作应在通风橱中进行，佩戴防护手套和护目镜。溶解时建议先以少量极性溶剂预溶，再逐步稀释至所需浓度。

#### 5. 质量控制与安全信息

本品通过 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ ，批次间质量稳定。安全数据表明，其急性毒性较低 (LD50 未明确)，但仍可能引起皮肤和眼睛刺激。不慎接触时，应立即用大量清

水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地环保法规，禁止直接排入下水道。详细安全信息请参阅随货提供的 MSDS 文件。

注：本产品仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。使用者应具备专业化学知识并遵守实验室安全规范。