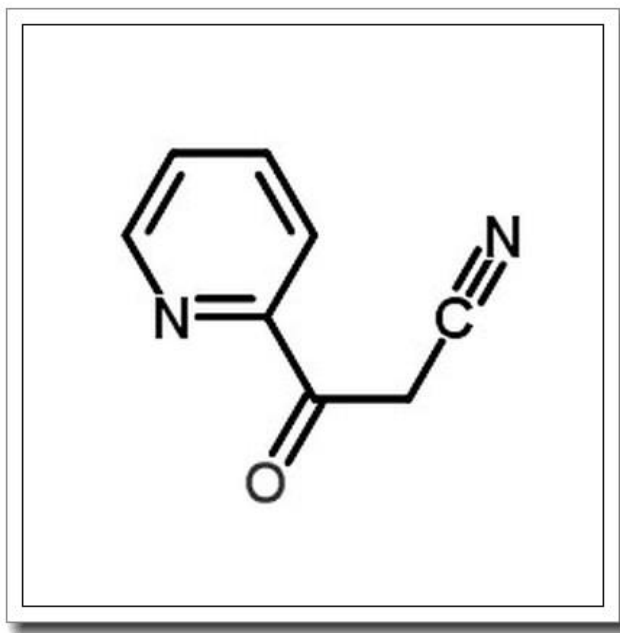


## 3-氧代-3-(2-吡啶基)丙腈

*3-oxo-3-(2-pyridinyl)propanenitrile*



### 产品基本信息

属性	值
化学名称	3-oxo-3-(2-pyridinyl)propanenitrile
中文名称	3-氧代-3-(2-吡啶基)丙腈
CAS 号	54123-21-6
分子式	C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O
分子量	146.146
纯度	>96%

## 产品说明

### 3-Oxo-3-(2-pyridinyl)propanenitrile 产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

3-Oxo-3-(2-pyridinyl)propanenitrile (CAS 号 54123-21-6) 是一种含吡啶环的氰基酮类化合物, 分子式为  $C_8H_6N_2O$ , 分子量 146.146。其结构特征为吡啶基与  $\beta$ -酮腈基团的结合, 赋予其独特的化学反应性。常温下呈白色至淡黄色结晶粉末, 易溶于极性有机溶剂 (如甲醇、乙腈), 微溶于水。本产品纯度 >96%, 通过 HPLC 和 NMR 验证, 符合生化试剂标准。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为有机合成中间体, 其  $\beta$ -酮腈结构可作为迈克尔受体参与亲核加成反应, 吡啶环则提供配位能力。在酶抑制研究中, 类似结构常作为金属蛋白酶或激酶的活性位点探针。其氰基与酮基的协同效应, 使其在构建杂环化合物 (如吡唑、噻啶衍生物) 中具有关键作用。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

医药研发领域: 用于合成抗肿瘤、抗炎药物先导化合物, 尤其适用于蛋白激酶抑制剂的结构修饰。

材料科学: 作为配体参与金属有机框架 (MOF) 材料的制备。

农业化学: 衍生化后可开发为新型杀虫剂或除草剂的活性成分。

实验室研究: 常用于有机方法学开发, 如不对称催化反应的底物测试。

#### 4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 避光、防潮, 建议温度 2-8°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。溶解推荐使用无水 DMF 或 THF, 溶液现配现用。与强氧化剂、强酸/碱分开存放。

#### 5. 质量控制与安全信息

批次质检包括熔点测定 (标准范围 98-102°C)、HPLC 纯度分析及水分含量测试

( $\leq 0.5\%$ )。安全数据表明, 该物质对眼睛和呼吸道有刺激性 (GHS 分类: H315-

H319-H335)，操作时应佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套。泄漏处理需用惰性吸附材料收集，避免扬尘。废弃物按危险化学品规范处置。

（注：本说明基于现有研究数据，具体应用需进一步实验验证。）