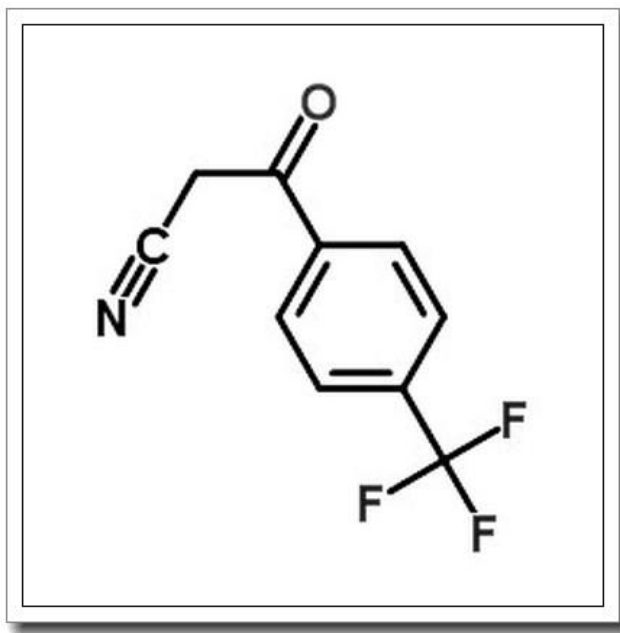


3-氧代-3-[4-(三氟甲基)苯基]丙腈

3-oxo-3-[4-(trifluoromethyl)phenyl]propanenitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-oxo-3-[4-(trifluoromethyl)phenyl]propanenitrile
中文名称	3-氧代-3-[4-(三氟甲基)苯基]丙腈
CAS 号	71682-94-5
分子式	C ₁₀ H ₆ F ₃ N ₁ O
分子量	213.156
纯度	>96%

产品说明

产品说明: 3-氧代-3-[4-(三氟甲基)苯基]丙腈 (CAS 号: 71682-94-5)

1. 产品概述与化学特性

3-氧代-3-[4-(三氟甲基)苯基]丙腈是一种含氟芳香族化合物, 化学式为 $C_{10}H_6F_3NO$, 分子量为 213.156。其结构特征为苯环对位连接三氟甲基 (-CF₃) 和 β -酮腈基团 (-COCH₂CN), 赋予其独特的电子效应和反应活性。该化合物常温下为白色至类白色结晶或粉末, 纯度通常高于 96%, 具有较高的化学稳定性, 但需避免强氧化剂和强碱环境。

2. 生物化学功能与重要性

作为 β -酮腈类衍生物, 该化合物在有机合成中可作为关键中间体, 其酮基和腈基官能团易于参与缩合、环化等反应。三氟甲基的引入显著增强其脂溶性和代谢稳定性, 使其在药物化学中具有特殊价值, 常用于构建含三氟甲基的杂环或药物分子骨架。

3. 主要应用领域与具体用途

- 医药研发: 用于合成抗炎、抗肿瘤等活性分子的前体, 尤其是含三氟甲基的靶向药物。
- 材料科学: 作为液晶材料或高分子单体的中间体, 改善材料的热稳定性和光学性能。
- 农药化学: 参与合成高效低毒农药, 利用三氟甲基提升化合物的生物活性。

4. 储存条件与使用建议

- 储存于密闭容器中, 避光、干燥, 温度建议 2-8°C 长期保存, 短期使用可置于室温阴凉处。
- 操作时需佩戴防护手套、护目镜, 在通风橱中进行称量与反应, 避免吸入粉尘或接触皮肤。
- 溶解性测试表明易溶于丙酮、DMF 等极性有机溶剂, 微溶于水, 建议根据实验需求选择溶剂。

5. 质量控制与安全信息

- 质量控制：通过 HPLC 检测纯度 (>96%)，并辅以核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 验证结构。
- 安全警示：本品对眼睛和皮肤有刺激性，误接触需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照国家危险化学品规范处置。
- 运输分类：非易燃固体，但需贴刺激性标签，符合一般化学品运输标准。

注：具体实验方案请结合文献方法优化，建议小试后放大反应规模。