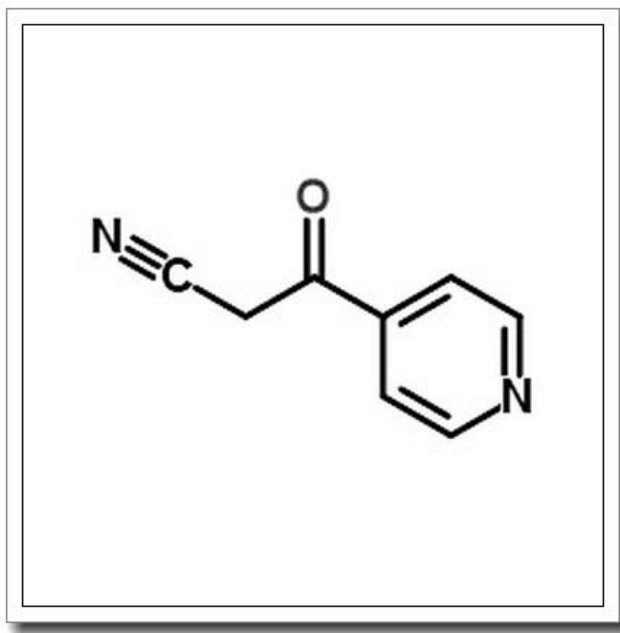


3-氧代-3-(4-吡啶基)丙腈

3-oxo-3-pyridin-4-ylpropanenitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-oxo-3-pyridin-4-ylpropanenitrile
中文名称	3-氧代-3-(4-吡啶基)丙腈
CAS 号	23821-37-6
分子式	C ₈ H ₆ N ₂ O
分子量	146.146
纯度	>96%

产品说明

3-oxo-3-pyridin-4-ylpropanenitrile 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-oxo-3-pyridin-4-ylpropanenitrile (化学名: 3-氧代-3-(4-吡啶基)丙腈) 是一种含吡啶环的有机化合物, CAS 号为 23821-37-6, 分子式为 C₈H₆N₂O, 分子量 146.146。其结构兼具酮基 (-CO-) 和腈基 (-CN) 官能团, 赋予其独特的反应活性。本品为白色至类白色结晶或粉末, 纯度 >96%, 易溶于极性有机溶剂 (如甲醇、乙醇), 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为重要的医药中间体, 其吡啶环和腈基结构使其在药物设计中具有广泛的应用潜力。酮基可参与缩合或加成反应, 而腈基能进一步转化为羧酸、酰胺等官能团, 是合成抗肿瘤、抗炎及神经系统药物 (如激酶抑制剂) 的关键砌块。其高反应活性也使其在生物偶联和标记技术中发挥作用。

3. 主要应用领域与具体用途

3-oxo-3-pyridin-4-ylpropanenitrile 主要用于以下领域:

- 医药研发: 作为小分子靶向药物的核心片段, 用于构建吡啶类衍生物。
- 农药化学: 参与合成具有杀虫或杀菌活性的杂环化合物。
- 材料科学: 作为配体或前体, 用于制备功能化高分子材料。

实验室中常用于探索 C-C 键形成反应及杂环修饰的模型底物。

4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于干燥、避光环境中, 推荐储存温度为 2-8°C。开封后建议充氮保护以避免吸湿。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解建议选用无水 DMF 或 DMSO, 并避免与强氧化剂、强酸共存。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, 残留溶剂符合 USP 标准。安全数据表明, 其急性毒性 (LD₅₀) 为大鼠经口 >500 mg/kg, 但长期暴露可能对眼睛和呼吸道产生刺激。操

作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩，若意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置应遵循当地化学品管理法规。

（注：本说明基于现有研究数据，实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。）