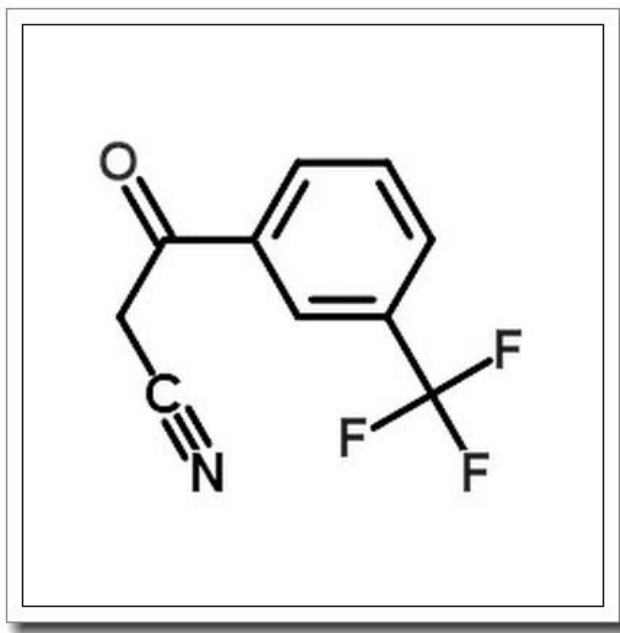


# 间三氟甲氧基苯甲酰乙腈

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



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	3-oxo-3-[3-(trifluoromethyl)phenyl]propanenitrile
中文名称	间三氟甲氧基苯甲酰乙腈
CAS 号	27328-86-5
分子式	C <sub>10</sub> H <sub>6</sub> F <sub>3</sub> N <sub>1</sub> O
分子量	213.156
纯度	>96%

## 产品说明

产品名称: 间三氟甲氧基苯甲酰乙腈 (3-oxo-3-[3-(trifluoromethyl)phenyl]propanenitrile)

CAS 号: 27328-86-5

分子式: C<sub>10</sub>H<sub>6</sub>F<sub>3</sub>N<sub>0</sub>

分子量: 213.156

纯度: >96%

### 1. 产品概述与化学特性

间三氟甲氧基苯甲酰乙腈是一种含氟有机化合物, 其分子结构中包含三氟甲基 (-CF<sub>3</sub>) 和氰基 (-CN) 官能团, 具有显著的电子效应和疏水性。该化合物为白色至淡黄色结晶或粉末, 可溶于常见有机溶剂如乙醇、丙酮和二甲基亚砜 (DMSO), 但在水中溶解度较低。其高纯度 (>96%) 确保了在合成和应用中的稳定性和可靠性。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为含氟芳香族衍生物, 该化合物在生物化学领域表现出独特的反应活性。三氟甲基的强吸电子特性使其成为药物分子设计和有机合成中的重要中间体。氰基的存在进一步增强了其参与亲核加成和环化反应的能力, 适用于构建杂环化合物或功能化分子骨架。

### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药、农药和材料科学领域。在医药研发中, 它是合成抗炎、抗肿瘤等活性分子的关键中间体。在农药化学中, 可用于制备含氟杀虫剂或除草剂。此外, 在功能材料领域, 其衍生物可用于液晶材料或高分子单体的合成。

### 4. 储存条件与使用建议

建议在 2-8°C 的干燥环境中避光保存, 长期储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。溶解时建议优先选择极性有机溶剂, 并根据实验需求进行浓度优化。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测，确保纯度>96%。安全数据表明，该化合物对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应佩戴防护手套和护目镜。若不慎接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地环保法规，禁止直接排放至下水道。

本说明仅供科研使用，不可用于临床或食品用途。具体应用前请查阅最新文献并评估安全性。