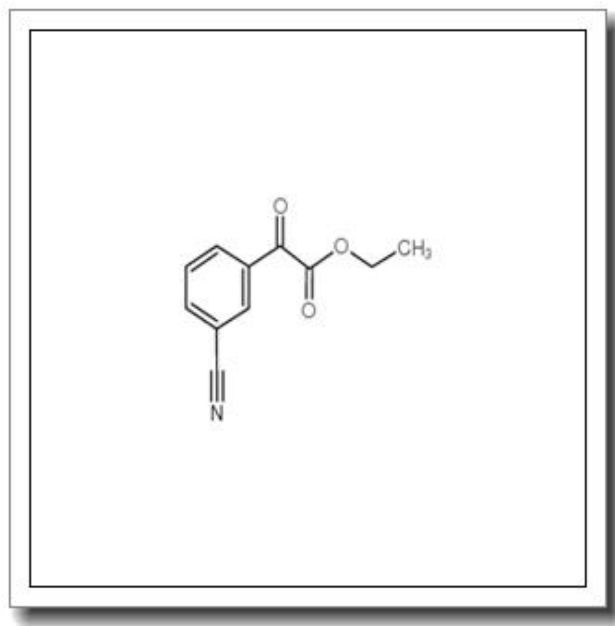


# 2-(3-氰基苯基)-2-氧代乙酸乙酯

*ethyl 2-(3-cyanophenyl)-2-oxoacetate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 2-(3-cyanophenyl)-2-oxoacetate
中文名称	2-(3-氰基苯基)-2-氧代乙酸乙酯
CAS 号	732249-89-7
分子式	C <sub>11</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>
分子量	203.194
纯度	≥96%

## 产品说明

### 2-(3-氰基苯基)-2-氧代乙酸乙酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

2-(3-氰基苯基)-2-氧代乙酸乙酯 (ethyl 2-(3-cyanophenyl)-2-oxoacetate) 是一种重要的有机合成中间体，化学式为  $C_{11}H_9N_3O_3$ ，分子量为 203.194。该化合物为白色至淡黄色结晶或粉末，CAS 号为 732249-89-7，纯度通常  $\geq 96\%$ 。其结构中包含氰基苯基和氧代乙酸乙酯官能团，使其在亲核取代和缩合反应中表现出较高的反应活性。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学领域主要作为合成复杂杂环化合物的关键前体，尤其适用于构建含氮杂环骨架。其氰基和酯基的协同作用可参与多种生物活性分子的合成，如药物分子中的吡啶类、喹啉类衍生物。此外，其  $\alpha$ -酮酯结构在酶抑制剂设计和蛋白质修饰研究中具有潜在应用价值。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发中，本品常用于抗肿瘤、抗炎药物的中间体合成，例如用于制备激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂。在材料科学领域，可作为有机光电材料的合成原料。实验室中亦用于开发新型荧光探针或金属配体。具体使用需结合反应条件优化，建议在无水惰性气体保护下进行敏感反应。

#### 4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，置于干燥、阴凉处（建议  $2-8^{\circ}C$ ），避免光照和湿气。长期保存推荐充入惰性气体。使用前需恢复至室温并检查结块情况，必要时进行重结晶纯化。操作时应佩戴防护手套、护目镜，在通风橱中进行称量。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度，批次间偏差控制在  $\pm 1\%$  以内。MS 和 NMR 数据可提供验证。安全提示：对眼睛和皮肤有刺激性，接触后立即用大量清水冲洗。不可与强氧化剂混存，燃烧会产生有毒氮氧化物。废弃物处理需符合当地化学品管理法规。

(注: 实际应用前请查阅最新版物质安全数据表 MSDS 并开展风险评估)