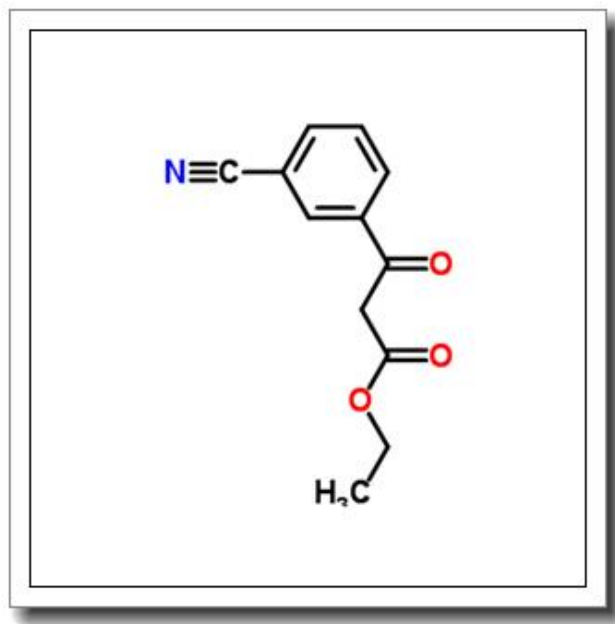


3-(3-氰基苯基)-3-氧代丙酸乙酯

ethyl 3-(3-cyanophenyl)-3-oxopropanoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 3-(3-cyanophenyl)-3-oxopropanoate
中文名称	3-(3-氰基苯基)-3-氧代丙酸乙酯
CAS 号	62088-13-5
分子式	C ₁₂ H ₁₁ N ₃ O ₃
分子量	217.221
纯度	≥96%

产品说明

3-(3-氰基苯基)-3-氧代丙酸乙酯产品说明

1. 产品概述与化学特性

3-(3-氰基苯基)-3-氧代丙酸乙酯 (ethyl 3-(3-cyanophenyl)-3-oxopropanoate) 是一种有机化合物, CAS 号为 62088-13-5, 分子式为 $C_{12}H_{11}NO_3$, 分子量为 217.221。本品为白色至淡黄色结晶或粉末, 纯度不低于 96%。其结构包含氰基苯基和 β -酮酯官能团, 具有较高的反应活性, 可作为重要的有机合成中间体。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学领域主要用于构建杂环化合物和药物分子骨架。其 β -酮酯结构易发生缩合、环化等反应, 是合成吡啶、喹啉等含氮杂环的关键前体。此外, 氰基的引入增强了分子的极性, 使其在药物设计中具有调节溶解性和生物活性的潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药、农药和材料科学领域。在医药研发中, 用于合成抗炎、抗肿瘤等活性分子的中间体; 在农药领域, 可作为杀虫剂或除草剂的合成原料; 在材料科学中, 可用于制备功能性高分子单体。具体用途包括但不限于:

- 药物中间体: 如非甾体抗炎药的结构修饰
- 有机合成: 通过 Knoevenagel 缩合制备 α, β -不饱和羰基化合物
- 荧光材料前体: 合成具有光电特性的共轭分子

4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光条件下储存, 温度保持在 2-8°C。开封后需充惰性气体 (如氮气) 保护, 防止吸潮和氧化。使用时应佩戴防护手套、护目镜, 在通风橱中操作。避免与强氧化剂、强酸强碱接触。溶解性测试表明, 本品易溶于乙醇、丙酮等有机溶剂, 难溶于水。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度 $\geq 96\%$, 并提供 COA (质量分析证书)。安全信息如

下:

- GHS 分类: 皮肤刺激 (类别 2)、眼睛刺激 (类别 2A)
- 安全术语: 避免吸入粉尘, 如接触皮肤或眼睛, 立即用大量清水冲洗并就医
- 废弃物处理: 按危险化学品规范处置, 不可直接排入环境