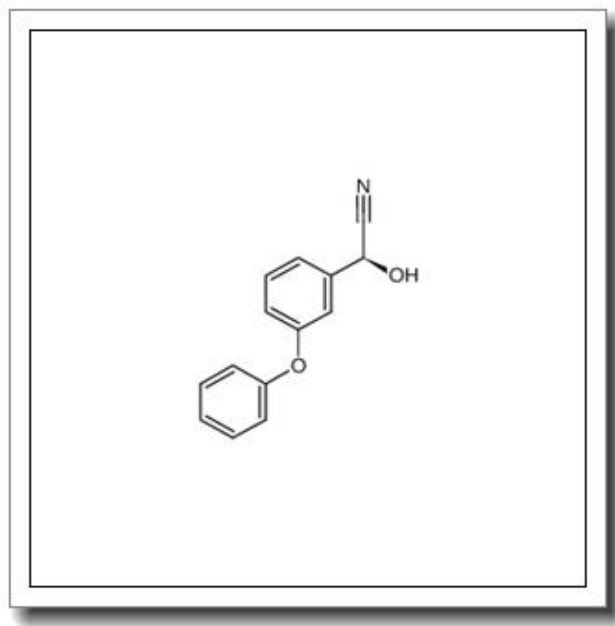


(S)-(3-苯氧基苯基)羟基乙腈

(2S)-2-hydroxy-2-(3-phenoxyphenyl)acetonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2S)-2-hydroxy-2-(3-phenoxyphenyl)acetonitrile
中文名称	(S)-(3-苯氧基苯基)羟基乙腈
CAS 号	61826-76-4
分子式	C ₁₄ H ₁₁ N ₂ O
分子量	225.243
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(2S)-2-hydroxy-2-(3-phenoxyphenyl)acetonitrile, 中文名称为(S)-(3-苯氧基苯基)羟基乙腈, 是一种具有光学活性的有机化合物。其 CAS 号为 61826-76-4, 分子式为 C₁₄H₁₁N₀₂, 分子量为 225.243。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在, 纯度通常不低于 96%。其结构中包含苯氧基苯基、羟基和氰基官能团, 这些特征使其在不对称合成和手性药物中间体制备中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为一种手性砌块, 在生物化学领域主要用于酶促反应研究和手性催化剂开发。其羟基和氰基的协同作用可参与多种亲核加成反应, 尤其适用于构建复杂手性分子骨架。在药物研发中, 它是合成某些抗抑郁剂和抗炎药的关键中间体, 能够显著提高目标产物的立体选择性和收率。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药领域, 本品常用于制备 β -肾上腺素受体激动剂和神经调节剂的前体化合物。在农药化学中, 可作为拟除虫菊酯类杀虫剂的手性合成单元。此外, 在材料科学领域, 其衍生物可用于液晶材料的开发。实验室中主要用于不对称催化反应的底物或配体优化研究。

4. 储存条件与使用建议

建议在 2-8°C 的干燥避光环境中密封保存, 长期储存需充入惰性气体保护。开封后应尽快使用, 避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明, 本品易溶于二甲基亚砜(DMSO)和甲醇, 水溶性较差, 配制溶液时需选择合适的有机溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据表明, 该化合物对眼睛和呼吸道有刺激性, 操作时应佩戴防护眼镜和防尘口罩。若不慎接

触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需遵守当地危险化学品管理条例，不可直接排入下水道。运输分类为 UN2811，需使用危险品专用包装。