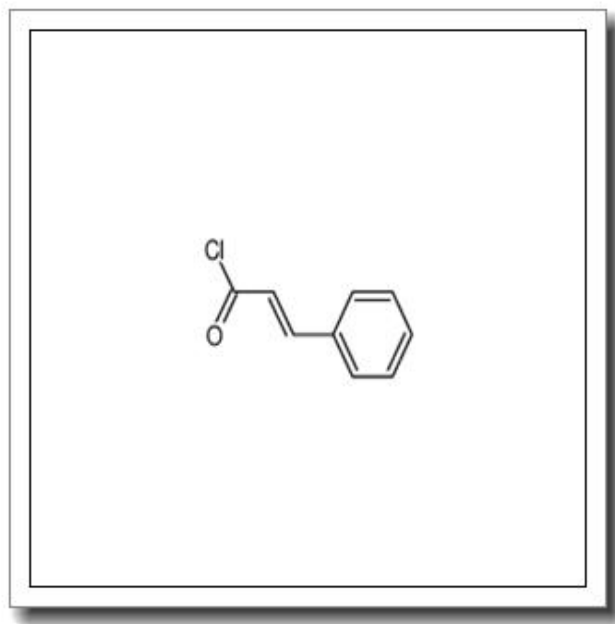


反-3-苯基丙烯酰氯

Trans-3-Phenylacryloyl Chloride



产品基本信息

属性	值
化学名称	Trans-3-Phenylacryloyl Chloride
中文名称	反-3-苯基丙烯酰氯
CAS 号	17082-09-6
分子式	C ₉ H ₇ ClO
分子量	166.604
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

反-3-苯基丙烯酰氯 (Trans-3-Phenylacryloyl Chloride) 是一种重要的有机合成中间体, 化学式为 C_9H_7ClO , 分子量为 166.604, CAS 号为 17082-09-6。该化合物为无色至淡黄色液体, 具有典型的酰氯类刺激性气味, 易溶于有机溶剂如二氯甲烷、乙醚和四氢呋喃。其纯度通常 $\geq 96\%$, 结构中包含反式构型的苯丙烯酰基团和活性酰氯官能团, 使其在亲核取代反应中表现出高反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为酰氯衍生物, 反-3-苯基丙烯酰氯可通过与氨基或羟基的缩合反应形成酰胺或酯类化合物, 广泛应用于药物分子和功能材料的合成。其苯丙烯骨架可参与共轭体系构建, 赋予产物紫外吸收或荧光特性, 在生物探针和光敏材料领域具有独特价值。此外, 该化合物是合成抗炎、抗肿瘤药物先导结构的关键砌块。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发中, 本品常用于制备酪氨酸激酶抑制剂和抗菌剂的核心片段; 在材料科学中, 可用于合成液晶单体或高分子聚合物交联剂。实验室中常作为酰化试剂用于蛋白质标记或小分子修饰, 例如通过酰胺键偶联荧光基团。工业上亦用于香精香料和农用化学品的中间体合成。

4. 储存条件与使用建议

需严格密封保存于 $-20^{\circ}C$ 至 $-10^{\circ}C$ 的干燥惰性环境中, 推荐使用棕色玻璃瓶充氮保护。开封后应在干燥箱内操作, 避免接触水汽。使用时应佩戴防化手套、护目镜及防毒面具, 在通风橱中进行反应。残余物需用乙醇淬灭后按危险废弃物处理。

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 $\leq 1\%$ 。其蒸气对粘膜有强刺激性, 皮肤接触可能导致化学灼伤, 操作时需符合 ISO 1513 标准。运输分类为 UN3265/8 类腐蚀性液体, 须使用 UN 认证包装。提供完整的 MSDS 报告, 包含急性毒性 (LD50 大鼠经口: 480mg/kg) 和生态毒性数据。