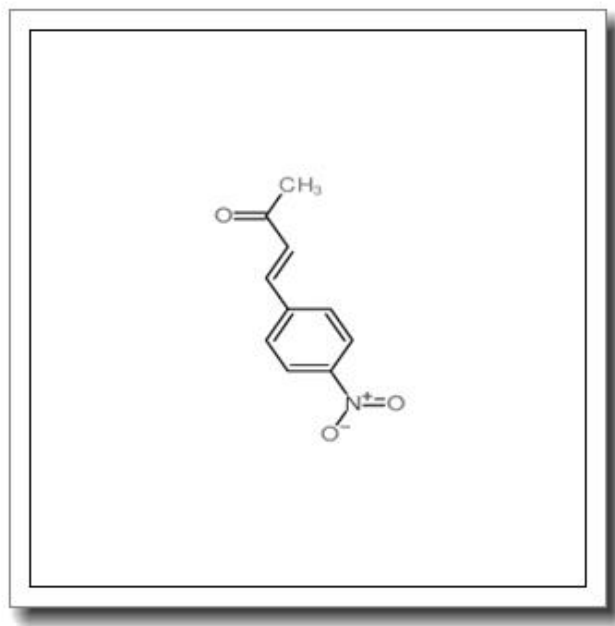


对硝基苄叉丙酮

(E)-4-(4-nitrophenyl)but-3-en-2-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	(E)-4-(4-nitrophenyl)but-3-en-2-one
中文名称	对硝基苄叉丙酮
CAS 号	3490-37-7
分子式	C ₁₀ H ₉ N ₃ O
分子量	191.183
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

对硝基苄叉丙酮 ((E)-4-(4-nitrophenyl)but-3-en-2-one) 是一种有机化合物, 化学式为 $C_{10}H_9NO_3$, 分子量为 191.183, CAS 号为 3490-37-7。本品为黄色至橙色结晶或粉末, 纯度 $\geq 96\%$ 。其结构中包含硝基苯基和 α, β -不饱和酮官能团, 具有典型的共轭双键特性, 因此在紫外-可见光谱中表现出显著吸收。该化合物在常温下稳定, 微溶于水, 易溶于有机溶剂如乙醇、丙酮和二甲基亚砜 (DMSO)。

2. 生物化学功能与重要性

对硝基苄叉丙酮因其独特的电子结构和反应活性, 在生物化学领域常作为迈克尔反应受体 (Michael acceptor), 能够与巯基或氨基等亲核基团发生共价结合。这一特性使其在酶抑制研究和蛋白质修饰中具有重要应用价值。此外, 其硝基苯基可作为发色团, 用于光化学反应或作为荧光探针的构建模块。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于有机合成、药物中间体制备及生物化学研究。在医药领域, 它是合成抗肿瘤、抗炎药物的重要前体; 在材料科学中, 可用于制备光敏材料或液晶材料。实验室中常作为标准品或反应底物, 用于研究不饱和酮的加成反应机制。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 $2-8^{\circ}C$ 避光干燥环境中, 避免与强氧化剂或还原剂接触。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解时优先选择 DMSO 或乙醇, 配制溶液后建议短期内使用, 以防降解。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度 $\geq 96\%$, 并提供完整的质检报告 (COA)。其急性毒性数据 (LD50) 显示为中等毒性, 操作时需避免吸入或皮肤接触。如不慎接触, 立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照国家危险化学品规范处置。

注: 以上信息基于现有研究数据, 具体应用需结合实验条件进一步验证。