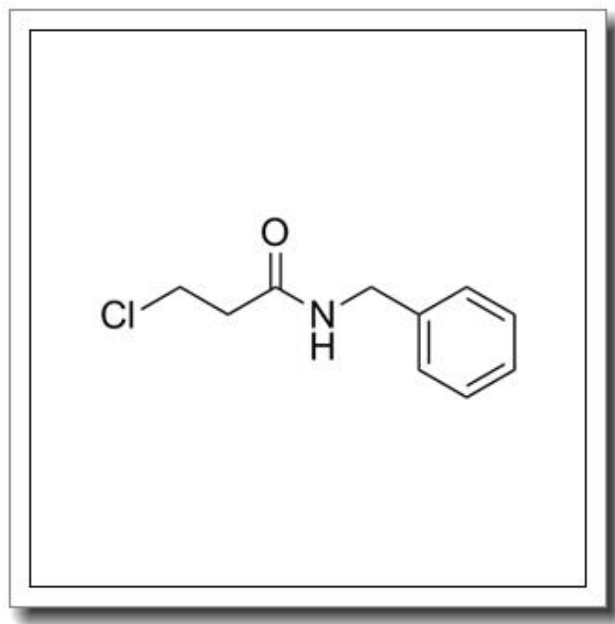


氯丙酰苄胺

N-benzyl-3-chloropropanamide



产品基本信息

属性	值
化学名称	N-benzyl-3-chloropropanamide
中文名称	氯丙酰苄胺
CAS 号	501-68-8
分子式	C ₁₀ H ₁₂ ClN ₁ O
分子量	197.661
纯度	≥ 96%

产品说明

N-苄基-3-氯丙酰胺产品说明书

1. 产品概述与化学特性

N-苄基-3-氯丙酰胺 (N-benzyl-3-chloropropanamide, CAS 501-68-8) 是一种有机氯化物, 分子式为 $C_{10}H_{12}ClNO$, 分子量 197.661。本品为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有酰胺键和氯代烷基的结构特征, 易溶于极性有机溶剂如乙醇、丙酮, 微溶于水。其化学稳定性良好, 但在强酸强碱条件下可能发生水解。

2. 生物化学功能与重要性

作为酰胺类衍生物, 该化合物可通过氯代烷基与生物分子中的亲核基团 (如巯基、氨基) 发生烷基化反应, 在药物化学中常用于构建活性分子骨架。其苄基结构赋予一定的脂溶性, 有利于穿透细胞膜, 在抑制剂或前药设计中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于以下领域:

- (1) 医药中间体: 用于合成抗癫痫、抗肿瘤等药物的关键中间体;
- (2) 农药开发: 作为除草剂或杀菌剂的活性组分前体;
- (3) 生化研究: 用于蛋白质修饰或酶活性位点的探针分子;
- (4) 材料科学: 参与制备功能性高分子材料的单体。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 避光、防潮, 温度控制在 $2-8^{\circ}C$ 。长期保存建议充氮保护。使用时应佩戴防护手套、护目镜, 在通风橱中操作, 避免吸入粉尘或接触皮肤。溶解时优先选用无水乙醇或 DMF 等有机溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本品通过 HPLC 检测纯度, 水分含量 $\leq 0.5\%$, 残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据如下:

- (1) GHS 分类: 皮肤刺激 (Category 2)、眼刺激 (Category 2A);

(2) 应急处理: 皮肤接触后立即用肥皂水冲洗, 误食需就医;

(3) 运输编码: UN 2811 (6.1 类危险品)。

注: 本产品仅供科研用途, 不适用于临床或食品领域。具体应用前需进行充分的安全评估实验。