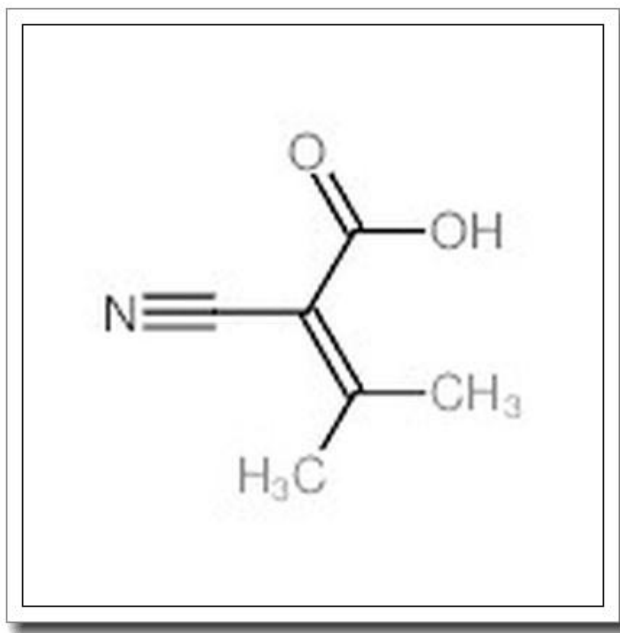


2-氰基-3-甲基丁-2-烯酸

2-cyano-3-methylbut-2-enoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-cyano-3-methylbut-2-enoic acid
中文名称	2-氰基-3-甲基丁-2-烯酸
CAS 号	759-21-7
分子式	C ₆ H ₇ N ₂ O ₂
分子量	125.125
纯度	>96%

产品说明

2-氰基-3-甲基丁-2-烯酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-氰基-3-甲基丁-2-烯酸 (2-cyano-3-methylbut-2-enoic acid) 是一种含氰基的 α, β -不饱和羧酸, 化学式为 $C_6H_7NO_2$, 分子量 125.125, CAS 号为 759-21-7。本品为白色至类白色结晶或粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有典型的不饱和酸与氰基的化学活性, 可参与亲核加成、酯化及聚合反应。其结构中烯键与氰基的共轭体系赋予其独特的电子特性, 在有机合成中作为关键中间体。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学领域主要作为酶抑制剂或修饰剂使用, 其氰基可特异性结合活性位点中的巯基或金属离子, 干扰靶标蛋白功能。此外, 其 α, β -不饱和结构能够与生物大分子发生迈克尔加成反应, 在药物开发中用于共价抑制剂的设计。

3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药研发: 作为激酶或蛋白酶抑制剂的合成砌块, 用于抗肿瘤及抗炎药物开发。
- 3.2 农药化学: 参与合成具有生物活性的拟除虫菊酯类化合物。
- 3.3 材料科学: 用于制备功能性高分子单体, 改善材料的光电性能。
- 3.4 学术研究: 作为探针分子研究酶机制或蛋白质相互作用。

4. 储存条件与使用建议

储存于密封避光容器中, 置于干燥、阴凉处 (建议 $2-8^{\circ}C$), 避免与氧化剂、强碱接触。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套及护目镜。溶解建议使用极性有机溶剂 (如 DMF、DMSO), 水溶性较差, 需注意 pH 调节以增强溶解性。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 残留溶剂符合 USP 标准。安全数据: 急性毒性 (口服 LD50 大鼠) 为 320 mg/kg, 属于有害物质; 皮肤接触可能引起刺激, 操作后需彻底清洗。废弃处理应遵循当地化学品管理法规, 建议通过专业机构焚烧降解。

(注: 本说明基于现有研究数据, 具体应用需结合实验条件验证。)