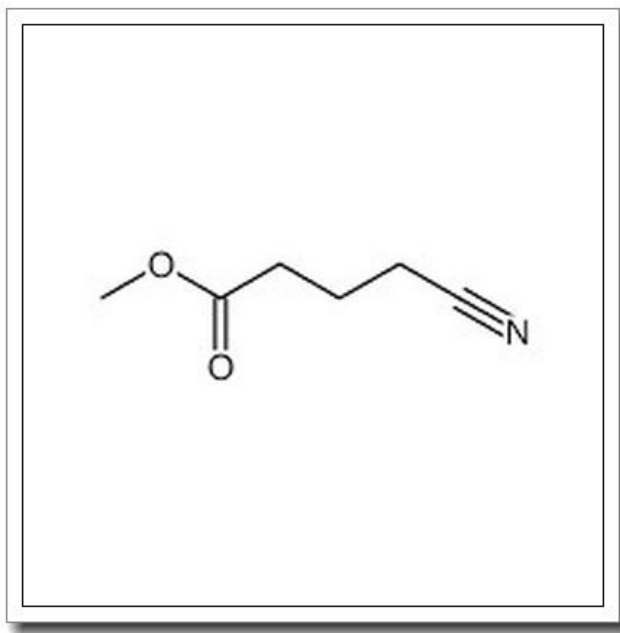


4-氰基丁酸甲酯

methyl 4-cyanobutanoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 4-cyanobutanoate
中文名称	4-氰基丁酸甲酯
CAS 号	41126-15-2
分子式	C ₆ H ₉ N ₂ O ₂
分子量	127.141
纯度	>96%

产品说明

4-氰基丁酸甲酯产品说明书

产品概述与化学特性

4-氰基丁酸甲酯 (methyl 4-cyanobutanoate, CAS 号 41126-15-2) 是一种重要的有机中间体, 分子式为 $C_6H_9NO_2$, 分子量 127.141。本品为无色至淡黄色透明液体, 纯度高于 96%, 具有酯类化合物的典型特性, 同时兼具氰基的反应活性。其结构中包含氰基和酯基两种官能团, 使其在有机合成中表现出优异的反应多样性。

生物化学功能与重要性

作为氰基羧酸酯类化合物, 4-氰基丁酸甲酯在生物化学领域主要用于构建含氮杂环化合物及氨基酸衍生物。氰基可通过水解、还原等反应转化为羧酸或氨基, 而酯基则可作为保护基或进一步反应的位点。这类结构单元在药物分子设计和生物活性分子合成中具有重要价值, 尤其在神经递质类似物和酶抑制剂开发中应用广泛。

主要应用领域与具体用途

1. 医药中间体: 用于合成抗癫痫药物、镇痛剂及抗肿瘤化合物的关键片段。
2. 农药化学: 作为杀虫剂和除草剂的合成前体, 如拟除虫菊酯类化合物的修饰。
3. 材料科学: 参与制备特种聚合物单体, 改善材料的耐热性和机械性能。
4. 科研试剂: 在有机方法学研究中作为氰基化试剂或酯交换反应底物。

储存条件与使用建议

本品需密封保存于阴凉干燥处, 推荐储存温度为 $2-8^{\circ}C$, 避免光照和潮湿环境。开封后建议充氮保护以延长保存期限。使用时应佩戴防护手套、护目镜, 并在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入蒸气。与强氧化剂、强酸强碱分开存放, 防止剧烈反应。

质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度, 批次间一致性控制在 $\pm 1\%$ 以内。MSDS 数据显示其具有刺激性, LD_{50} (大鼠经口) 为 1200 mg/kg, 属于低毒类化学品。若不慎接触眼睛

或皮肤，需立即用大量清水冲洗至少 15 分钟并就医。废弃处理需遵循当地环保法规，建议通过专业化学品回收机构处置。

注：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合用户工艺条件进一步验证。