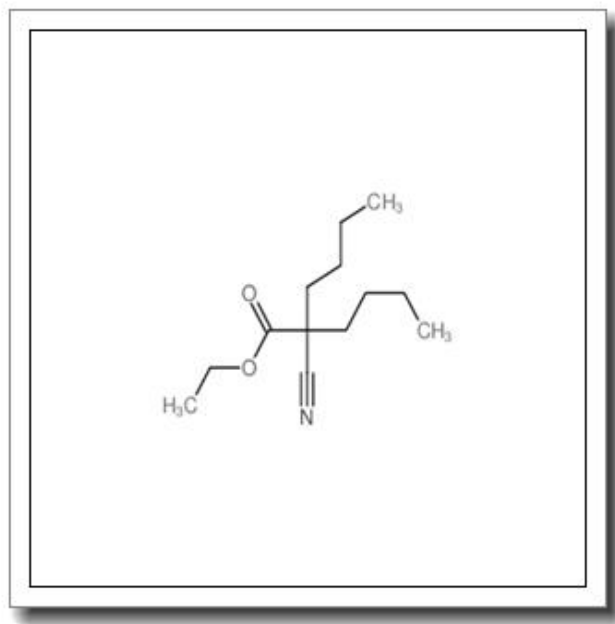


2-丁基-2-氰基己酸乙酯

ethyl 2-butyl-2-cyanohexanoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 2-butyl-2-cyanohexanoate
中文名称	2-丁基-2-氰基己酸乙酯
CAS 号	67105-41-3
分子式	C13H23NO2
分子量	225.327
纯度	≥ 96%

产品说明

2-丁基-2-氰基己酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-丁基-2-氰基己酸乙酯 (ethyl 2-butyl-2-cyanohexanoate) 是一种有机氰基酯类化合物, 化学式为 $C_{13}H_{23}NO_2$, 分子量为 225.327, CAS 号为 67105-41-3。本品为无色至淡黄色透明液体, 纯度 $\geq 96\%$, 具有酯类特征气味。其结构中同时含有氰基 (-CN) 和酯基 (-COOR), 使其兼具亲核性和水解稳定性, 在有机合成中表现出独特的反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为多功能合成砌块, 其氰基可参与缩合、加成等反应, 酯基则易于水解或转酯化。在生物化学领域, 其结构类似天然脂肪酸衍生物, 可用于模拟脂质代谢中间体或酶抑制剂研究。其 α 位氰基的强吸电子效应能显著改变分子电子分布, 在药物设计中被用于调节活性分子的脂溶性和靶向性。

3. 主要应用领域与具体用途

医药中间体: 用于合成含氰基的喹诺酮类抗菌药及心血管药物前体。

农药化学: 作为拟除虫菊酯类杀虫剂的改性组分, 可增强药效持久性。

材料科学: 参与制备特种丙烯酸酯聚合物, 改善材料耐候性和附着力。

科研试剂: 在不对称催化反应中作为手性助剂或配体合成原料。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 放置于阴凉干燥处 (建议 $2-8^{\circ}C$ 避光保存)。与强氧化剂、强酸强碱分库存放。使用时应佩戴防护手套、护目镜, 在通风橱中操作。若需长期储存, 建议充氮气保护以防止氰基水解。开封后建议一次性使用完毕, 或严格密封后标注开封日期。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度, GC-MS 验证结构, 水分含量控制在 0.1% 以下。安全数据表明其 LD₅₀ (大鼠经口) 为 2150 mg/kg, 属于低毒类, 但接触皮肤可能引起轻

微刺激。意外接触时需立即用大量清水冲洗，若吸入蒸汽应转移至空气新鲜处。废弃物处理需符合当地危险化学品管理条例，建议采用专业焚烧法降解。

（注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验方案调整。产品规格可能因批次略有差异，请以随货质检报告为准。）