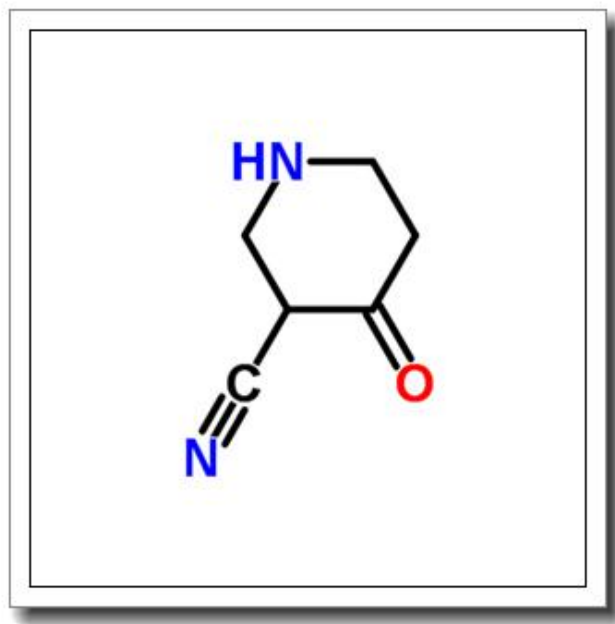


3-氰基-4-哌啶酮

4-oxopiperidine-3-carbonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-oxopiperidine-3-carbonitrile
中文名称	3-氰基-4-哌啶酮
CAS 号	19166-75-7
分子式	C ₆ H ₈ N ₂ O
分子量	124.141
纯度	≥ 96%

产品说明

3-氰基-4-哌啶酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-氰基-4-哌啶酮 (4-oxopiperidine-3-carbonitrile) 是一种含氮杂环化合物，化学式为 $C_6H_8N_2O$ ，分子量 124.141，CAS 号为 19166-75-7。本品为白色至类白色结晶粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，兼具酮基和氰基官能团，具有较高的反应活性。其熔点为 $120-123^{\circ}C$ ，易溶于极性有机溶剂（如甲醇、乙醇），微溶于水。该结构特征使其成为有机合成中重要的中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌啶酮衍生物，3-氰基-4-哌啶酮在生物碱类似物合成中具有关键作用。其氰基可参与亲核加成反应，酮基则易与胺类或肼类缩合，形成杂环或桥环结构。这类结构广泛存在于药物活性分子中，例如镇痛剂、抗精神病药及抗菌化合物的合成前体。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药和农药中间体合成。在医药领域，可用于构建中枢神经系统药物（如多巴胺受体调节剂）的核心骨架；在农药研发中，作为杀虫剂或除草剂的修饰基团。此外，在材料科学中可用于制备功能性高分子单体。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，避光、防潮，建议温度 $2-8^{\circ}C$ 。长期保存需充惰性气体保护。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二甲基亚砜 (DMSO)。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度，水分含量 $\leq 0.5\%$ ，残留溶剂符合 ICH 标准。本品属于刺激性化学品，可能引起眼睛和皮肤刺激。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需遵守当地环保法规，禁止直接排放。

（注：本说明基于现有实验数据，具体应用需结合用户工艺验证。）