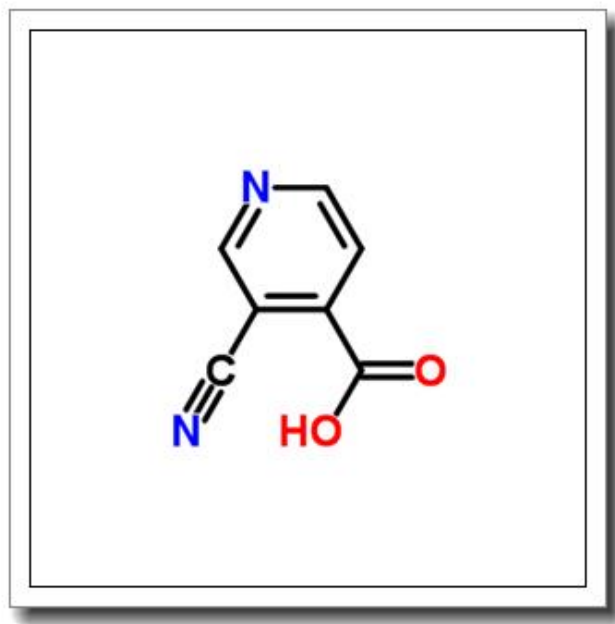


3-氰基异烟酸

3-cyanopyridine-4-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-cyanopyridine-4-carboxylic acid
中文名称	3-氰基异烟酸
CAS 号	1060802-59-6
分子式	C ₇ H ₄ N ₂ O ₂
分子量	148.119
纯度	≥ 96%

产品说明

3-氰基异烟酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-氰基异烟酸 (3-cyanopyridine-4-carboxylic acid) 是一种含氰基和羧基的吡啶衍生物，化学式为 $C_7H_4N_2O_2$ ，分子量 148.119，CAS 登记号为 1060802-59-6。本品为白色至类白色结晶性粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，兼具吡啶环的芳香性和氰基、羧基的反应活性，可溶于极性有机溶剂（如 DMSO、甲醇），微溶于水。其结构中的氰基和羧基为后续修饰提供了关键位点，是合成医药中间体和功能材料的重要原料。

2. 生物化学功能与重要性

作为烟酸（维生素 B3）的结构类似物，3-氰基异烟酸可通过竞争性抑制参与 NAD^+ 合成的酶类，在生化研究中用于探究辅酶代谢途径。氰基的强吸电子特性使其能够干扰电子传递链，在细胞能量代谢研究中具有工具化合物价值。此外，其吡啶骨架可作为金属配体，在酶模拟或催化体系中发挥作用。

3. 主要应用领域与具体用途

医药领域：作为关键中间体用于合成抗结核药物（如异烟肼衍生物）及抗肿瘤靶向化合物。

材料科学：用于制备导电高分子材料或液晶显示器的配向层添加剂。

农业化学：参与合成高效低毒杀虫剂的吡啶类前体。

研究用途：在有机合成中作为构建块，通过氰基水解或羧基缩合反应制备多官能团化合物。

4. 储存条件与使用建议

储存于密封避光容器中，置于阴凉干燥处（建议 $2-8^{\circ}C$ ），避免与强氧化剂、强酸强碱共存。开封后需充惰性气体保护以防吸潮。使用时需在通风橱中操作，佩戴防护手套和护目镜。溶解建议采用梯度升温法（先溶于少量 DMSO 再稀释），避免直接高温处理以防氰基分解。

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。MSDS 显示其急性毒性类别为 4 级 ($LD_{50} > 2000 \text{ mg/kg}$)，但粉末可能刺激呼吸道和黏膜。意外接触时需用大量清水冲洗 15 分钟，吸入后立即转移至空气新鲜处。废弃物应作为有害化学品处置，遵守当地环保法规。

注：本产品仅供科研或工业用途，不适用于药品、食品或家庭使用。具体应用前请查阅最新文献并开展小试验证。