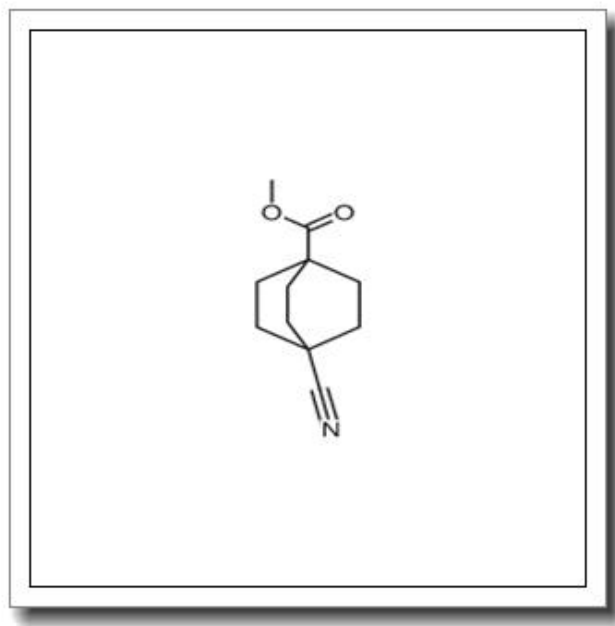


4-氰基双环[2.2.2]辛烷-1-羧酸甲酯

methyl 1-cyanobicyclo[2.2.2]octane-4-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 1-cyanobicyclo[2.2.2]octane-4-carboxylate
中文名称	4-氰基双环[2.2.2]辛烷-1-羧酸甲酯
CAS 号	54202-05-0
分子式	C ₁₁ H ₁₅ N ₂ O ₂
分子量	193.242
纯度	≥ 96%

产品说明

4-氰基双环[2.2.2]辛烷-1-羧酸甲酯产品说明

1. 产品概述与化学特性

4-氰基双环[2.2.2]辛烷-1-羧酸甲酯 (methyl 1-cyanobicyclo[2.2.2]octane-4-carboxylate) 是一种具有双环结构的有机化合物, CAS 号为 54202-05-0, 分子式为 $C_{11}H_{15}NO_2$, 分子量为 193.242。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在, 纯度通常不低于 96%。其结构中的氰基和酯基赋予其独特的反应活性, 使其在有机合成和药物化学中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其刚性双环结构和极性官能团, 常作为中间体用于构建复杂分子骨架。氰基的强吸电子特性可参与亲核加成反应, 而酯基则易于水解或转化为其他官能团。这些特性使其在药物设计、材料科学和生物活性分子合成中具有广泛应用潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

4-氰基双环[2.2.2]辛烷-1-羧酸甲酯主要用于以下领域:

- 药物研发: 作为合成神经活性化合物或酶抑制剂的中间体。
- 材料科学: 参与制备具有特殊光学或力学性能的高分子材料。
- 有机合成: 用于构建双环体系或作为手性合成的起始原料。

4. 储存条件与使用建议

该产品需密封保存于干燥、阴凉的环境中, 避免光照和潮湿。推荐储存温度为 2-8°C, 长期保存建议充入惰性气体。使用时需在通风良好的环境中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明, 其易溶于有机溶剂如甲醇、乙醇和乙腈, 难溶于水。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测, 确保纯度 $\geq 96\%$ 。安全信息如下:

- 危害提示: 可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激。

- 防护措施: 操作时佩戴防护手套、护目镜和防尘口罩。
- 应急处理: 如接触皮肤或眼睛, 立即用大量清水冲洗并就医。

本产品仅供科研用途, 不适用于食品、药品或家庭用途。使用前请查阅相关文献并遵守实验室安全规范。