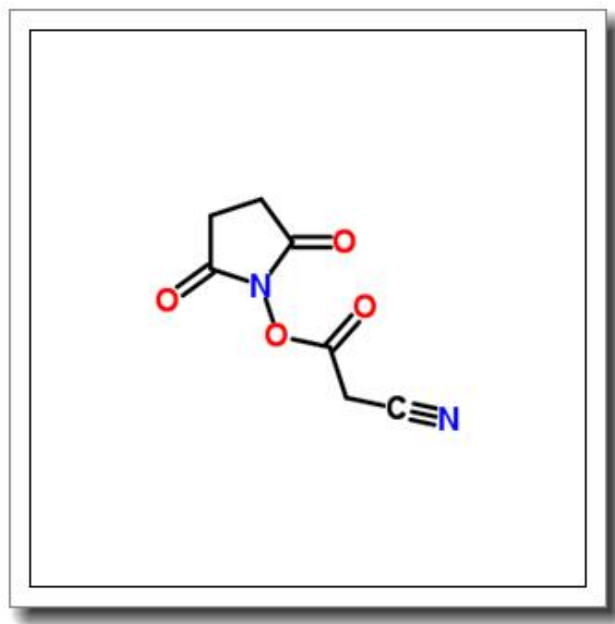


氰基乙酸 N-羟基丁二酰亚胺酯

(2,5-dioxopyrrolidin-1-yl) 2-cyanoacetate



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2,5-dioxopyrrolidin-1-yl) 2-cyanoacetate
中文名称	氰基乙酸 N-羟基丁二酰亚胺酯
CAS 号	56657-76-2
分子式	C7H6N2O4
分子量	182.133
纯度	≥96%

产品说明

产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为(2,5-二氧代吡咯烷-1-基)氰基乙酸酯 ((2,5-dioxopyrrolidin-1-yl) 2-cyanoacetate), 中文名称为氰基乙酸 N-羟基丁二酰亚胺酯, CAS 号为 56657-76-2。其分子式为 C₇H₆N₂O₄, 分子量为 182.133, 纯度 ≥96%。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 易溶于极性有机溶剂 (如 DMF、DMSO), 在常温下稳定, 但需避免潮湿环境。

2. 生物化学功能与重要性

氰基乙酸 N-羟基丁二酰亚胺酯是一种重要的活性酯类化合物, 其分子中的 N-羟基琥珀酰亚胺 (NHS) 基团能够高效活化羧基, 与氨基发生缩合反应形成稳定的酰胺键。这一特性使其在肽合成、蛋白质修饰及生物偶联等领域具有关键作用。其氰基乙酸结构进一步扩展了反应多样性, 适用于构建功能化分子探针或药物载体。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于生物化学与药物研发领域:

1. 多肽合成: 作为羧基活化试剂, 用于固相或液相肽链延长。
2. 蛋白质标记: 通过偶联荧光基团或生物素, 制备检测用探针。
3. 小分子修饰: 用于药物分子结构改造, 增强其靶向性或稳定性。
4. 材料科学: 参与制备功能化高分子材料, 如生物相容性水凝胶。

4. 储存条件与使用建议

储存条件: 需密封保存于干燥、避光环境中, 推荐温度为 -20° C, 长期储存建议充入惰性气体 (如氮气)。开封后应尽快使用, 避免反复冻融。

使用建议: 反应需在无水条件下进行, 建议以 DMF 或乙腈为溶剂, 控制反应 pH 为 7-9 以获得最佳偶联效率。操作时需佩戴防护手套及护目镜。

5. 质量控制与安全信息

质量控制: 产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, 水分含量 ≤0.5%, 残留溶剂符合 ICH 标

准。

安全信息：本品对眼睛、皮肤及呼吸道有刺激性，接触后应立即用大量清水冲洗。

不可吸入粉尘，操作应在通风橱中进行。废弃物需按危险化学品规范处置。

（全文共 436 字）