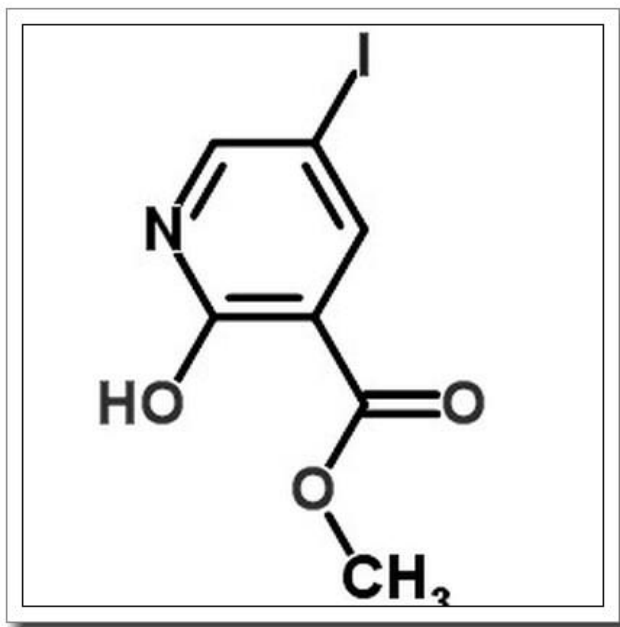


2-氧代-5-碘-1,2-二氢-3-吡啶甲酸甲酯

Methyl 5-iodo-2-oxo-1,2-dihydropyridine-3-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 5-iodo-2-oxo-1,2-dihydropyridine-3-carboxylate
中文名称	2-氧代-5-碘-1,2-二氢-3-吡啶甲酸甲酯
CAS 号	116387-40-7
分子式	C7H6IN03
分子量	279.032
纯度	>96%

产品说明

2-氧代-5-碘-1,2-二氢-3-吡啶甲酸甲酯 (Methyl 5-iodo-2-oxo-1,2-dihydropyridine-3-carboxylate) 是一种重要的有机合成中间体, CAS 号为 116387-40-7, 分子式为 C₇H₆IN₃O₃, 分子量为 279.032。本品为白色至类白色结晶或粉末, 纯度高于 96%, 具有良好的化学稳定性和溶解性, 可溶于多种有机溶剂如二甲基亚砷 (DMSO)、甲醇和乙腈等。

1. 产品概述与化学特性

该化合物属于吡啶酮衍生物, 其结构中的碘原子和酯基使其成为有机合成中的多功能砌块。碘原子的引入为后续的偶联反应 (如 Suzuki 偶联) 提供了活性位点, 而 2-氧代-1,2-二氢吡啶骨架在药物化学中具有广泛的应用价值。其熔点和沸点数据需参考具体实验条件, 建议通过核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 进行结构确证。

2. 生物化学功能与重要性

作为杂环化合物, 2-氧代-5-碘-1,2-二氢-3-吡啶甲酸甲酯在生物活性分子设计中具有重要作用。吡啶酮结构常见于抗菌、抗肿瘤和抗炎药物的核心骨架中, 碘原子的存在可进一步衍生化, 用于构建复杂分子或标记化合物。

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的合成, 具体包括:

- 作为抗病毒或抗肿瘤药物的前体, 用于结构修饰和活性筛选。
- 在有机催化反应中作为配体或底物, 参与 C-C 键或 C-N 键的构建。
- 用于荧光探针或生物标记物的合成, 发挥其杂环结构的特性。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光保存, 长期储存需充入惰性气体 (如氮气) 以保持稳定性。使用时需在干燥环境中操作, 避免与强氧化剂接触。溶解时建议先以少量 DMSO 溶解, 再稀释至所需浓度。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过高效液相色谱 (HPLC) 检测, 纯度 ≥ 96%。使用时需穿戴防护手套和护

目镜，避免吸入或接触皮肤。如不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照危险化学品处理规范处置。

以上信息仅供参考，具体实验条件需根据实际需求调整。