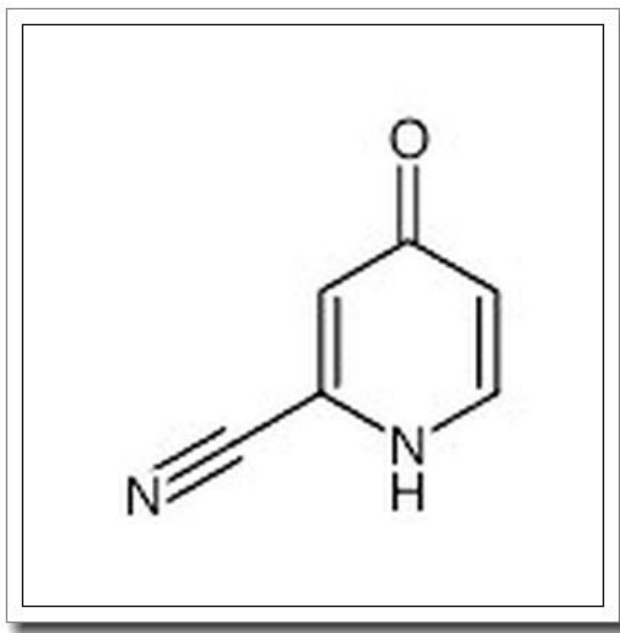


2-氰基-4-羟基吡啶

4-oxo-1H-pyridine-2-carbonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-oxo-1H-pyridine-2-carbonitrile
中文名称	2-氰基-4-羟基吡啶
CAS 号	475057-86-4
分子式	C ₆ H ₄ N ₂ O
分子量	120.109
纯度	>96%

产品说明

4-oxo-1H-pyridine-2-carbonitrile 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 4-oxo-1H-pyridine-2-carbonitrile, 中文名 2-氰基-4-羟基吡啶, CAS 号 475057-86-4, 分子式 C₆H₄N₂O, 分子量 120.109。外观为白色至类白色结晶粉末, 纯度>96%。其结构中的吡啶酮环与氰基赋予分子独特的电子效应, 使其兼具亲电性与亲核性, 易参与缩合、取代等反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡啶类衍生物, 该化合物是构建杂环骨架的关键中间体, 尤其在药物化学中用于修饰生物活性分子的药效团。氰基的强吸电子特性可调节分子极性, 而吡啶酮结构能增强与靶标蛋白的氢键相互作用, 因此在激酶抑制剂和抗菌剂设计中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药研发领域:

- 作为合成抗肿瘤药物 (如 CDK 抑制剂) 的起始原料
- 用于制备抗菌剂中的吡啶酮类结构单元
- 在材料科学中作为有机发光二极管 (OLED) 的电子传输材料前体

实验室研究中, 常用于探索新型杂环化合物的构效关系。

4. 储存条件与使用建议

储存于密封避光容器中, 置于干燥、阴凉处 (建议 2-8°C), 避免与强氧化剂、酸碱接触。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套及护目镜。溶解性测试表明易溶于 DMSO、DMF 等极性溶剂, 推荐使用前通过氮气保护防止氧化。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 验证纯度>96%, 残留溶剂符合 USP 标准。MSDS 数据显示其急性毒性类别为 4 (LD₅₀>2000 mg/kg), 但粉末可能刺激呼吸道和眼睛。意外接触时, 立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物处置需遵守当地危险化学品法规。

本产品仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。具体实验方案建议参考文献报道的合成与应用方法。