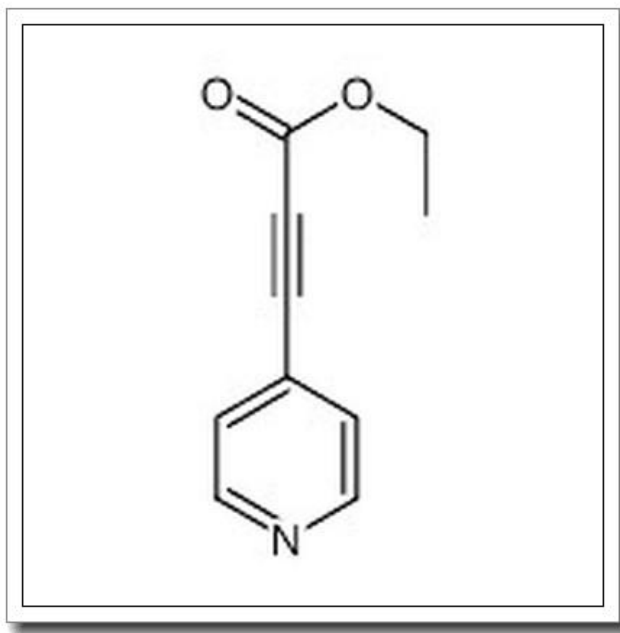


3-(4-吡啶基)丙炔酸乙酯

Ethyl 3-(4-pyridinyl)-2-propynoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 3-(4-pyridinyl)-2-propynoate
中文名称	3-(4-吡啶基)丙炔酸乙酯
CAS 号	66869-71-4
分子式	C ₁₀ H ₉ N ₀ O ₂
分子量	175.184
纯度	>96%

产品说明

3-(4-吡啶基)丙炔酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-(4-吡啶基)丙炔酸乙酯 (Ethyl 3-(4-pyridinyl)-2-propynoate) 是一种含吡啶环和炔酯结构的有机化合物，化学式为 $C_{10}H_9NO_2$ ，分子量 175.184，CAS 号为 66869-71-4。本品为无色至淡黄色液体或低熔点固体，纯度 >96%，兼具吡啶基的碱性和丙炔酸酯的反应活性，易溶于常见有机溶剂如乙醇、二氯甲烷和乙酸乙酯。其分子中的炔键和酯基可作为关键官能团参与偶联、环加成等反应。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学领域作为重要的合成中间体，其吡啶环结构可模拟天然生物碱的配体特性，与金属离子或酶活性位点结合。炔基的点击化学反应性使其成为生物共价标记和探针修饰的常用模块，尤其在蛋白质偶联和核酸衍生物合成中具有独特价值。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发中，本品用于构建激酶抑制剂和抗肿瘤药物的吡啶炔酯骨架；在材料科学中，可作为聚合单体参与功能高分子材料的合成。此外，其衍生物广泛应用于荧光标记物、MOF 材料配体及不对称催化领域。实验室常用作交叉偶联反应（如 Sonogashira 反应）的底物。

4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体（如氩气）保护下密封储存，温度控制在 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ ，避光防潮。开封后需尽快使用，剩余试剂应充氮保存。使用时需在通风橱中操作，避免与强氧化剂接触。溶解推荐使用干燥 THF 或 DMF，反应体系需严格除氧。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 和 NMR 确保纯度 >96%，批次间保留时间偏差 <2%。本品对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应佩戴护目镜和丁腈手套，若接触需立即用大量清水冲洗。安全数据

表 (SDS) 编号 PS-66869-71-4, 危险代码 Xi (刺激性), 运输分类为 UN2810 6.1 类。废弃物处置需符合当地有机危险废物法规。