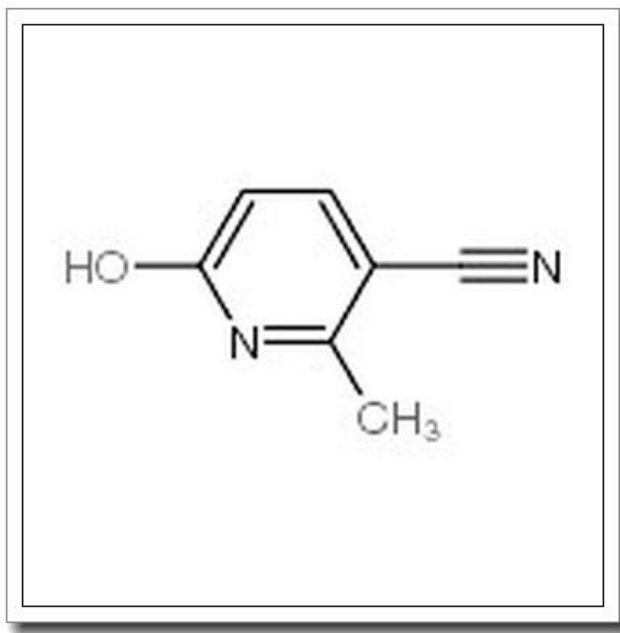


3-氰基-6-羟基-2-甲基吡啶

2-methyl-6-oxo-1H-pyridine-3-carbonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-methyl-6-oxo-1H-pyridine-3-carbonitrile
中文名称	3-氰基-6-羟基-2-甲基吡啶
CAS 号	41877-40-1
分子式	C ₇ H ₆ N ₂ O
分子量	134.135
纯度	>96%

产品说明

2-甲基-6-氧代-1H-吡啶-3-甲腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 2-methyl-6-oxo-1H-pyridine-3-carbonitrile (CAS 41877-40-1)，中文别名 3-氰基-6-羟基-2-甲基吡啶，分子式 C₇H₆N₂O，分子量 134.135。外观为白色至类白色结晶粉末，纯度≥96%。该化合物属于吡啶衍生物，结构中含氰基和酮基官能团，使其兼具亲电性与氢键结合能力，在极性有机溶剂（如 DMSO、甲醇）中溶解性良好，水溶性较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡啶类杂环化合物，其结构中的氰基和酮基可作为药物活性基团参与多种生物化学反应。该分子在酶抑制研究中表现出潜在活性，尤其与 NAD(P)H 依赖性酶系的相互作用受到关注。其羟基吡啶结构可模拟天然辅酶结合位点，在开发抗代谢类药物的先导化合物优化中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药中间体：用于合成抗肿瘤、抗炎药物候选分子，特别是作为激酶抑制剂的核心骨架。
- 3.2 材料科学：作为配体参与金属有机框架（MOF）材料的制备，改善材料的光电性能。
- 3.3 分析化学：衍生化试剂用于 LC-MS 检测中痕量物质的标记分析。
- 3.4 基础研究：作为荧光探针前体，用于活性氧物种（ROS）的检测体系构建。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，避光保存于-20℃至 4℃干燥环境，长期储存建议充氮保护。开封后需在干燥箱中操作，避免吸湿。溶解时优先选用无水 DMSO，配制工作液需现配现用。与强氧化剂、强酸强碱分开存放。

5. 质量控制与安全信息

HPLC 检测纯度≥96%，水分含量≤0.5%，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据：

急性毒性（口服大鼠 LD50）>500 mg/kg，皮肤刺激性类别 3。操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩，意外接触眼睛应立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物处置需符合当地危险化学品管理法规。

（注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件进一步验证。）