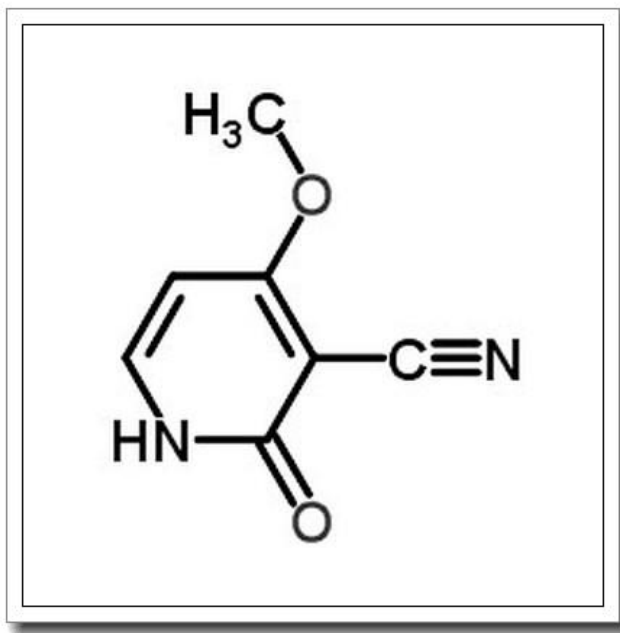


4-甲氧基-2-氧代-1,2-二氢-3-氰基吡啶

4-methoxy-2-oxo-1H-pyridine-3-carbonitrile



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|--|
| 化学名称 | 4-methoxy-2-oxo-1H-pyridine-3-carbonitrile |
| 中文名称 | 4-甲氧基-2-氧代-1,2-二氢-3-氰基吡啶 |
| CAS 号 | 21642-98-8 |
| 分子式 | C7H6N2O2 |
| 分子量 | 150.135 |
| 纯度 | >96% |

产品说明

4-甲氧基-2-氧代-1,2-二氢-3-氰基吡啶产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 4-methoxy-2-oxo-1H-pyridine-3-carbonitrile, CAS 号为 21642-98-8, 分子式 C₇H₆N₂O₂, 分子量 150.135, 是一种白色至类白色结晶粉末。其结构中包含甲氧基、氰基和吡啶酮环, 赋予其独特的电子分布和反应活性。纯度经 HPLC 验证 ≥96%, 熔点为 185-188° C (分解), 易溶于极性有机溶剂如 DMSO 和甲醇, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为吡啶酮衍生物, 具有显著的生物电子等排特性, 可模拟天然嘧啶碱基的构象。其氰基和酮基官能团使其成为药物化学中关键的中间体, 常用于构建杂环骨架。在酶抑制研究中, 能通过氢键相互作用靶向蛋白活性位点, 尤其与激酶和脱氢酶家族具有潜在结合能力。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本品是合成抗肿瘤和抗病毒药物 (如非核苷类逆转录酶抑制剂) 的重要前体。材料科学中用于制备荧光标记物和配位聚合物。具体用途包括:

1. 作为 EGFR 抑制剂类药物的核心片段
2. 用于构建光敏材料中的电子受体单元
3. 在有机催化中作为路易斯碱配体

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C、避光、干燥条件下长期储存, 开封后需充氮气保护。使用前需恢复至室温并避免吸湿。溶解推荐使用无水 DMSO (浓度 ≤50mM), 水溶液需现配现用。实验操作应在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

批次质检包含 HPLC 纯度分析、LC-MS 分子量验证及卡尔费休水分测定。安全数据表明该物质对眼睛和呼吸道有刺激性 (GHS 分类: H315-H319-H335), 操作需佩戴

护目镜和防尘口罩。废弃物应作为有害化学品处置，不可直接排入下水道。急救措施包括皮肤接触时用大量清水冲洗至少 15 分钟，吸入后立即转移至空气新鲜处。

本产品仅限科研用途，不适用于诊断或治疗用途。