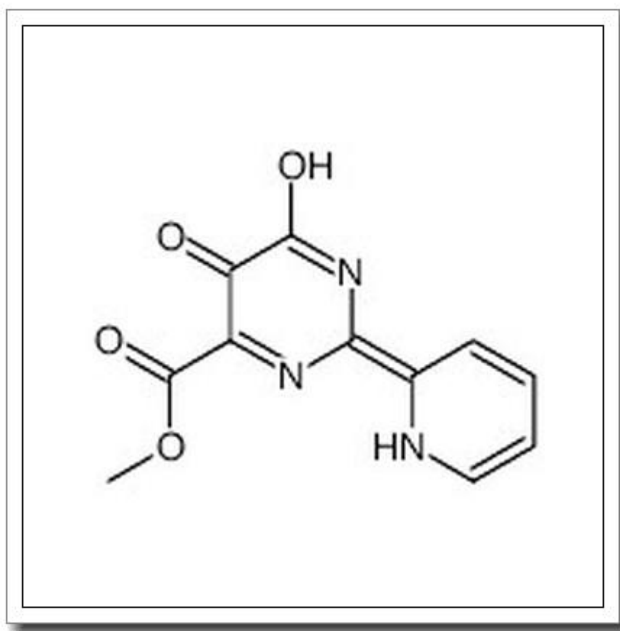


5,6-二羟基-2-吡啶-2-基-嘧啶-4-羧酸甲酯

methyl 5,6-dioxo-2-(1H-pyridin-2-ylidene)pyrimidine-4-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 5,6-dioxo-2-(1H-pyridin-2-ylidene)pyrimidine-4-carboxylate
中文名称	5,6-二羟基-2-吡啶-2-基-嘧啶-4-羧酸甲酯
CAS 号	849475-89-4
分子式	C11H9N3O4
分子量	247.207
纯度	>96%

产品说明

5,6-二羟基-2-吡啶-2-基-嘧啶-4-羧酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 methyl 5,6-dioxo-2-(1H-pyridin-2-ylidene)pyrimidine-4-carboxylate, CAS 号为 849475-89-4, 分子式为 C₁₁H₉N₃O₄, 分子量为 247.207。该化合物是一种含有吡啶和嘧啶双环结构的羧酸甲酯衍生物, 纯度经 HPLC 验证大于 96%, 常温下呈淡黄色至类白色结晶粉末, 微溶于水, 易溶于 DMSO、DMF 等有机溶剂。其结构中的活性羰基和共轭体系使其具有独特的电子分布特性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为嘧啶类衍生物, 可通过与金属离子配位或参与氢键相互作用, 在生物体系中发挥重要作用。其结构中的吡啶氮原子和嘧啶二酮单元可作为酶抑制剂的设计核心, 尤其适用于靶向 NAD(P)H 依赖酶的活性研究。在光敏材料领域, 其共轭结构表现出显著的光电转换特性。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发中, 本品常用于构建抗肿瘤或抗病毒先导化合物, 特别是作为激酶抑制剂的中间体。材料科学领域用于制备有机发光二极管 (OLED) 的电子传输层材料。实验室研究中可作为荧光探针的合成前体, 或用于金属有机框架 (MOF) 材料的修饰配体。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20°C 干燥环境中, 避免光照和湿度影响。开封后需充氮保护, 长期储存建议使用琥珀色玻璃瓶。使用前需恢复至室温平衡 2 小时, 配制溶液时应优先选用无水级溶剂并现配现用。工作浓度需根据具体实验体系优化, 推荐初始测试范围为 10-100 μM。

5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱 (MS) 和核磁共振 (NMR) 双重验证, 批号关联完整分析证书 (COA)。操作时需佩戴防护手套及护目镜, 皮肤接触后立即用大量清水冲洗。其

粉尘可能引起呼吸道刺激，应在通风橱中处理。废弃物需按危险化学品规范处置，避免强氧化剂接触。

（注：实际使用前请查阅最新版物质安全数据表 MSDS 获取完整安全信息）