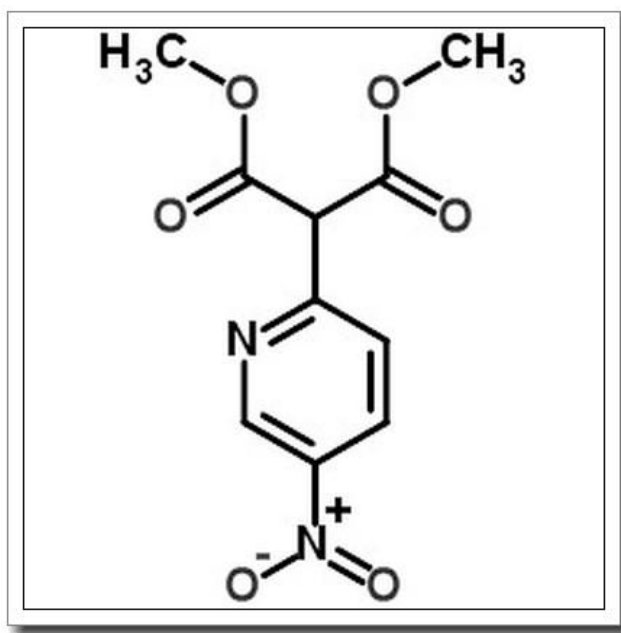


dimethyl 2-(5-nitropyridin-2-yl)malonate

dimethyl 2-(5-nitropyridin-2-yl)malonate



产品基本信息

属性	值
化学名称	dimethyl 2-(5-nitropyridin-2-yl)malonate
中文名称	dimethyl 2-(5-nitropyridin-2-yl)malonate
CAS 号	68719-87-9
分子式	C10H10N2O6
分子量	254.196
纯度	>96%

产品说明

5-硝基吡啶-2-基丙二酸二甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-硝基吡啶-2-基丙二酸二甲酯 (dimethyl 2-(5-nitropyridin-2-yl)malonate, CAS 号 68719-87-9) 是一种高纯度有机化合物, 分子式为 $C_{10}H_{10}N_2O_6$, 分子量 254.196。该化合物为淡黄色至白色结晶粉末, 纯度 >96%, 具有硝基吡啶基团与丙二酸酯结构的双重特性, 使其在有机合成中表现出高反应活性。其结构中硝基的强吸电子效应与酯基的可水解性, 为后续衍生化反应提供了多种可能。

2. 生物化学功能与重要性

作为吡啶类衍生物, 该化合物在生物化学领域主要用于构建含氮杂环骨架, 是合成药物活性分子 (如抗肿瘤、抗炎化合物) 的关键中间体。其硝基可通过还原转化为氨基, 进一步参与偶联或缩合反应, 在蛋白酶抑制剂或核苷类似物的开发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发中, 本品常用于制备 5-氨基吡啶-2-羧酸衍生物, 后者是多种激酶抑制剂的核心结构。在材料科学领域, 可作为配体参与金属有机框架 (MOF) 的合成。此外, 在农药化学中用于构建具有杀虫活性的杂环化合物。具体实验用途包括: 多步合成中的硝基还原前体、Suzuki 偶联反应的底物、以及杂环扩环反应的起始物料。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、避光的惰性环境中, 长期储存温度需控制在 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 。开封后需充氮保护以防止吸潮降解。使用时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明其在 DMSO 和 DMF 中溶解度良好 ($>50\text{ mg/mL}$), 推荐使用无水溶剂以保障反应效率。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。MSDS 数据显示其急

性毒性 (LD50 大鼠口服) >2000 mg/kg, 属于低毒类物质, 但硝基化合物在高温或强还原条件下可能释放有害气体。废弃物处理需遵循当地法规, 建议通过专业化学废料回收渠道处置。实验操作应在通风橱中进行, 避免与强氧化剂或强酸共储。

注: 本说明基于现有实验数据编制, 具体应用需结合用户工艺验证。技术参数更新恕不另行通知, 请以最新 COA 报告为准。