

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

产品图片未找到

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
产品目录号	
CAS 号	849475-89-4
分子式	C11H9N3O4
分子量	247.207
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为甲基 5,6-二氧化代-2-(1H-吡啶-2-亚基)嘧啶-4-羧酸酯，化学式为 C₁₁H₉N₃O₄，分子量 247.207，CAS 号为 849475-89-4。该化合物是一种黄色至橙黄色结晶粉末，纯度大于 96%，具有良好的溶解性于有机溶剂如 DMSO 和甲醇，微溶于水。其结构中的吡啶亚基与嘧啶二酮骨架赋予其独特的电子分布特性，可作为有机合成中间体或配体使用。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其共轭体系和缺电子特性，在生物化学领域表现出显著的活性。其结构中的嘧啶二酮片段可模拟天然核苷酸结构，与酶活性位点产生相互作用，潜在应用于酶抑制剂开发。此外，吡啶亚基的配位能力使其在金属配合物合成中具有重要价值，可能用于催化或分子识别研究。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发中，本品可作为先导化合物用于设计抗病毒或抗肿瘤药物，尤其针对依赖嘧啶代谢的靶点。材料科学领域可用于合成光电功能材料，如有机半导体或荧光探针。实验室中常用作有机合成砌块，通过进一步修饰构建复杂杂环体系。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于-20℃干燥环境中，避免光照与潮湿。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时需在通风橱中操作，佩戴防护手套与护目镜。溶解推荐使用无水 DMSO，配制后溶液建议现配现用，长期储存可能导致降解。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度≥96%，核磁共振谱与质谱验证结构。潜在危害包括皮肤刺激性与呼吸道敏感性，操作时应避免吸入粉尘。安全数据表（SDS）包含详细毒理学数据，建议在紧急情况下使用大量清水冲洗接触部位并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。