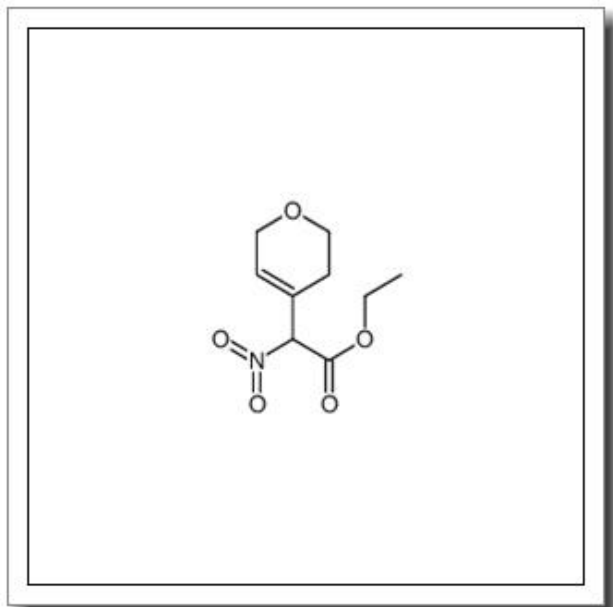


2-(3,6-二氢-2H-吡喃-4-基)-2-硝基乙酸乙酯

Ethyl 3,6-dihydro-2H-pyran-4-yl(nitro)acetate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 3,6-dihydro-2H-pyran-4-yl(nitro)acetate
中文名称	2-(3,6-二氢-2H-吡喃-4-基)-2-硝基乙酸乙酯
CAS 号	921755-40-0
分子式	C ₉ H ₁₃ N ₀ O ₅
分子量	215.203
纯度	≥96%

产品说明

2-(3,6-二氢-2H-吡喃-4-基)-2-硝基乙酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 Ethyl 3,6-dihydro-2H-pyran-4-yl(nitro)acetate, CAS 号 921755-40-0, 是一种含吡喃环和硝基的酯类化合物。分子式 C₉H₁₃N₀₅, 分子量 215.203, 常温下为无色至淡黄色液体或低熔点固体。其结构中硝基与酯基的协同作用赋予该分子高反应活性, 易参与亲核加成、环化等反应。纯度标准 ≥96% (HPLC), 需避光保存以避免硝基光解。

2. 生物化学功能与重要性

作为硝基乙酸酯衍生物, 该化合物在生物化学中主要用于模拟活性氧中间体, 研究自由基反应机制。其吡喃环结构可嵌入生物大分子, 而硝基作为强吸电子基团, 能调节酶活性位点的电子密度, 常用于蛋白酶抑制剂的合成前体。在糖化学领域, 可作为糖苷键断裂的探针分子。

3. 主要应用领域与具体用途

医药研发领域: 作为关键中间体用于合成抗病毒药物 (如 HIV 蛋白酶抑制剂) 和抗炎分子。

材料科学: 参与制备光响应性高分子材料, 其硝基可作为光敏交联位点。

农业化学: 衍生为新型杀虫剂的前驱化合物, 通过干扰昆虫神经传导发挥作用。

分析化学: 用作 HPLC 检测的衍生化试剂, 增强含羟基化合物的紫外吸收。

4. 储存条件与使用建议

储存条件: 需密封保存于 -20°C 至 4°C 惰性环境 (如氩气保护), 远离氧化剂和强酸强碱。开封后建议分装使用, 避免反复冻融。

使用建议: 实验操作应在通风橱中进行, 佩戴防化手套及护目镜。溶解性测试表明易溶于 DMF、DMSO 等极性非质子溶剂, 水溶液中易水解, 建议现配现用。

5. 质量控制与安全信息

质量控制: 批次检测包括 HPLC 纯度分析 (C18 柱, 乙腈/水梯度洗脱)、水分含量

（卡尔费休法）及重金属残留（ICP-MS）。

安全信息：根据 GHS 分类，具皮肤刺激性（类别 2）和眼损伤风险（类别 1）。泄漏处理需用惰性吸附材料收集，禁用可燃溶剂冲洗。急救措施：皮肤接触后立即用聚乙二醇-400 冲洗，眼部暴露需持续生理盐水冲洗 15 分钟并就医。

（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优化。安全数据以最新 MSDS 为准。）