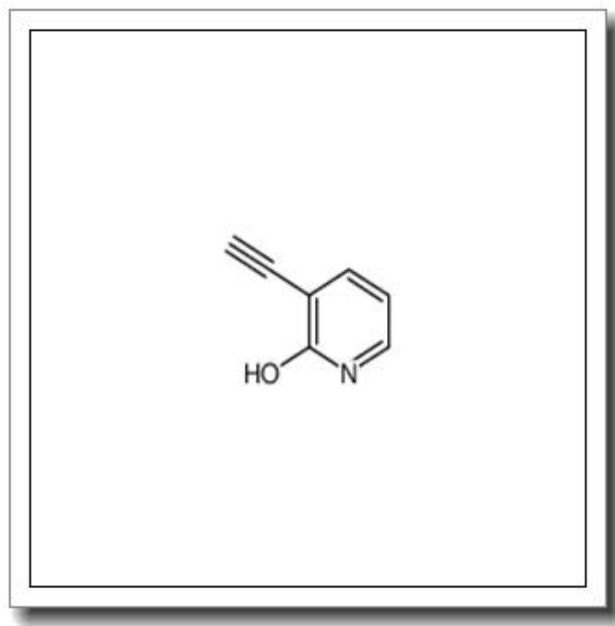


3-乙炔吡啶-2-醇

3-ethynyl-1H-pyridin-2-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-ethynyl-1H-pyridin-2-one
中文名称	3-乙炔吡啶-2-醇
CAS 号	142502-88-3
分子式	C ₇ H ₅ N ₁ O
分子量	119.121
纯度	≥ 96%

产品说明

3-乙炔吡啶-2-醇产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-乙炔吡啶-2-醇 (3-ethynyl-1H-pyridin-2-one) 是一种含炔基和吡啶酮结构的杂环化合物, 化学式为 C_7H_5NO , 分子量 119.121, CAS 号为 142502-88-3。本品为白色至淡黄色结晶或粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有显著的极性特征, 可溶于常见有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO, 但在水中溶解度较低。其分子中的炔基和吡啶酮结构赋予其独特的反应活性, 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

该化合物因其炔基的点击化学反应特性及吡啶酮的氢键结合能力, 在生物共轭和药物设计领域具有重要价值。炔基可通过铜催化的叠氮-炔环加成反应 (CuAAC) 高效连接生物分子, 而吡啶酮结构可参与金属配位或作为氢键受体, 影响蛋白质相互作用。这些特性使其成为探针修饰、靶向药物开发和化学生物学研究的理想工具分子。

3. 主要应用领域与具体用途

3-乙炔吡啶-2-醇广泛应用于以下领域:

- (1) 药物研发: 作为小分子抑制剂的核心骨架, 用于激酶或蛋白酶抑制剂的合成;
- (2) 生物标记: 通过炔基标记核酸、蛋白质或多肽, 用于荧光成像或质谱分析;
- (3) 材料科学: 作为功能单体参与聚合物合成, 制备具有光电特性的高分子材料;
- (4) 催化化学: 作为配体与过渡金属 (如钯、铜) 形成催化剂, 用于偶联反应。

4. 储存条件与使用建议

本品需避光密封保存于 $-20^{\circ}C$ 干燥环境中, 长期储存建议充入惰性气体 (如氮气)。开封后需在干燥器内保存, 避免吸湿。使用时需在惰性气体保护下操作 (如

氩气手套箱)，尤其涉及金属催化反应时。溶解建议选用无水 DMSO 或乙醇，溶液现配现用，避免反复冻融。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，MS 和 NMR 验证结构。使用时需穿戴防护装备（手套、护目镜及实验服），避免吸入粉尘或接触皮肤。其 LD50 数据尚未完全明确，但类似吡啶衍生物可能具有刺激性或神经毒性。如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地化学品管理法规，禁止直接排放至环境中。

（全文共计 498 字）