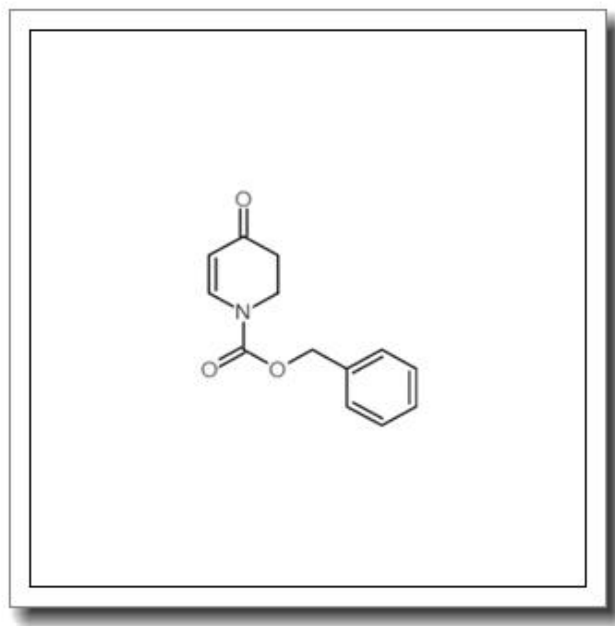


4-氧代-3,4-二氢吡啶-1(2H)-羧酸苄酯

benzyl 4-oxo-2,3-dihydropyridine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	benzyl 4-oxo-2,3-dihydropyridine-1-carboxylate
中文名称	4-氧代-3,4-二氢吡啶-1(2H)-羧酸苄酯
CAS 号	185847-84-1
分子式	C ₁₃ H ₁₃ N ₃ O ₃
分子量	231.247
纯度	≥96%

产品说明

产品名称: 4-氧代-3,4-二氢吡啶-1(2H)-羧酸苄酯

化学名称: benzyl 4-oxo-2,3-dihydropyridine-1-carboxylate

CAS 号: 185847-84-1

分子式: C₁₃H₁₃N₃O₃

分子量: 231.247

纯度: ≥96%

1. 产品概述与化学特性

4-氧代-3,4-二氢吡啶-1(2H)-羧酸苄酯是一种有机化合物,属于二氢吡啶类衍生物。其分子结构中包含一个苄酯基团和一个4-氧代二氢吡啶环,具有较高的反应活性。该化合物为白色至类白色固体,可溶于常见有机溶剂如二甲基亚砜

(DMSO)、甲醇和乙腈,但在水中溶解度较低。其CAS号为185847-84-1,分子量为231.247,纯度为96%以上,适合用于精细化学合成和药物研发。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学领域具有重要的应用价值。其结构中的二氢吡啶环和苄酯基团使其成为合成多种生物活性分子的关键中间体。特别是在药物化学中,它可用于构建含氮杂环化合物,这些杂环结构常见于抗菌、抗炎和抗肿瘤药物中。此外,其4-氧代基团可作为反应位点,进一步衍生化以满足不同研究需求。

3. 主要应用领域与具体用途

4-氧代-3,4-二氢吡啶-1(2H)-羧酸苄酯广泛应用于医药研发和有机合成领域。具体用途包括:

- 作为药物中间体,用于合成具有生物活性的吡啶类化合物;
- 在催化反应中作为底物,研究新型催化体系的效率;
- 用于构建杂环化合物库,支持高通量筛选和药物发现;
- 在材料科学中,作为功能分子的前体,用于开发新型高分子材料。

4. 储存条件与使用建议

为确保产品的稳定性和安全性，建议在以下条件下储存和使用：

- 储存于干燥、阴凉的环境中，避免阳光直射；
- 温度控制在 2-8° C，长期保存建议置于惰性气体（如氮气）保护下；
- 使用前需恢复至室温，避免吸湿；
- 操作时佩戴防护手套和护目镜，在通风良好的环境下进行。

5. 质量控制与安全信息

本产品经过严格的质量控制，纯度通过高效液相色谱（HPLC）验证，确保 $\geq 96\%$ 。

安全信息如下：

- 可能对眼睛、皮肤和呼吸道产生刺激，避免直接接触；
- 如不慎接触，立即用大量清水冲洗，并寻求医疗帮助；
- 远离火源和氧化剂，储存于密闭容器中；
- 废弃物需按照当地法规处理，避免环境污染。

本产品仅供科研用途，不适用于食品、药品或化妆品等直接人体应用。