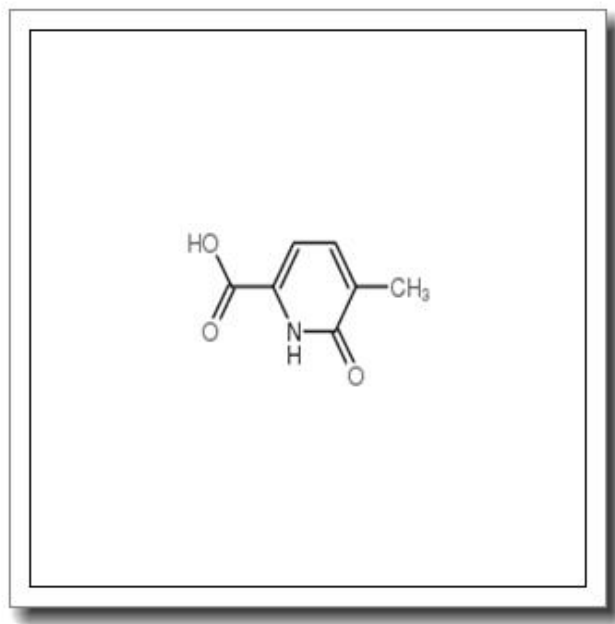


5-甲基-6-氧代-1,6-二氢吡啶-2-羧酸

5-Methyl-6-oxo-1,6-dihydropyridine-2-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-Methyl-6-oxo-1,6-dihydropyridine-2-carboxylic acid
中文名称	5-甲基-6-氧代-1,6-二氢吡啶-2-羧酸
CAS 号	115185-79-0
分子式	C7H7NO3
分子量	153.135
纯度	≥96%

产品说明

5-甲基-6-氧代-1,6-二氢吡啶-2-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-甲基-6-氧代-1,6-二氢吡啶-2-羧酸 (CAS 号: 115185-79-0) 是一种具有特定杂环结构的有机羧酸化合物, 分子式为 $C_7H_7NO_3$, 分子量为 153.135。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在, 纯度 $\geq 96\%$, 其结构特征为吡啶环上 5 位甲基取代和 6 位酮基修饰, 同时 2 位羧酸基团赋予其酸性及配位能力。该物质易溶于极性有机溶剂 (如 DMSO、甲醇), 微溶于水, 需注意其固态下对光热敏感的特性。

2. 生物化学功能与重要性

作为二氢吡啶衍生物, 该化合物在生物体内可参与氮代谢相关途径, 其结构类似天然嘧啶代谢中间体, 可能干扰核苷酸合成或酶活性。6 位酮基与 2 位羧酸形成的共轭体系使其具备金属离子螯合能力, 在模拟生物酶辅因子或开发金属蛋白酶抑制剂方面具有研究价值。其分子骨架也是构建更复杂药物分子 (如抗高血压或神经保护剂) 的关键中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本品常用于合成靶向钙离子通道调节剂的先导化合物, 或作为结构模块用于构建新型杂环类药物。在生化研究中, 可用作金属蛋白酶抑制实验的对照品, 或通过修饰其羧基制备荧光标记探针。农业化学中, 其衍生物可能参与植物生长调节剂的开发。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20°C 、避光、干燥惰性气体环境下长期储存, 开封后需充氩气密封。使用前需平衡至室温以避免结露, 称量应在通风橱中进行。推荐用 DMSO 配制母液 (浓度 $\leq 50\text{mM}$), 现配现用。水溶液体系需调节 pH 至 7-8 以增强溶解性。避免与强氧化剂或还原剂直接接触。

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 USP 标准。核磁共振 ($^1\text{H NMR}$) 与质

谱 (MS) 数据可提供验证。安全警示: 可能引起眼睛和皮肤刺激, 操作时需佩戴护目镜及丁腈手套。若吸入粉尘, 应立即转移至空气新鲜处。废弃物处置需遵守当地危险化学品法规, 建议通过专业焚化处理。

(注: 本说明基于现有研究数据, 实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。)