

# 1-Benzyl-5-phenylbarbituric acid

---

产品图片未找到

## 产品基本信息

属性	值
化学名称	1-Benzyl-5-phenylbarbituric acid
产品目录号	
CAS 号	72846-00-5
分子式	C <sub>17</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
分子量	294.305
纯度	>96%

## 产品说明

### 1-苄基-5-苯基巴比妥酸产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

1-苄基-5-苯基巴比妥酸 (1-Benzyl-5-phenylbarbituric acid) 是一种有机化合物, 化学式为  $C_{17}H_{14}N_2O_3$ , 分子量为 294.305, CAS 号为 72846-00-5。本品为白色至类白色结晶粉末, 纯度 >96%, 属于巴比妥酸衍生物, 具有典型的嘧啶三酮结构。其化学结构中苄基与苯基的引入赋予其独特的疏水性和空间位阻效应, 在有机合成与药物化学中具有重要价值。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物通过竞争性抑制  $\gamma$ -氨基丁酸 (GABA) 受体亚型发挥作用, 可作为中枢神经系统调节剂的研究工具。其结构与巴比妥类药物类似, 但苄基取代使其代谢稳定性和脂溶性显著提高, 适用于神经药理学研究中靶点作用机制的探索。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于以下领域:

- 1) 医药研发: 作为先导化合物用于镇静催眠类药物的结构优化;
- 2) 生化研究: 用于 GABA 受体相关信号通路的体外实验;
- 3) 分析标准品: 作为 HPLC 或 LC-MS 检测的参比物质;
- 4) 有机合成: 作为构建杂环化合物的关键中间体。

#### 4. 储存条件与使用建议

储存于密封避光容器中, 建议在 2-8°C 干燥环境下保存, 避免与强氧化剂接触。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明, 本品易溶于 DMSO (50mg/mL), 微溶于乙醇, 水溶性较差, 建议根据实验需求选择合适溶剂。

#### 5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 >96%, 残留溶剂符合 USP 标准。安全数据表明, 其急性毒性 LD50 (大鼠口服) 为 1200mg/kg, 属于刺激性物质。操作时应避免吸入粉尘, 如接触皮肤需立即用大量清水冲洗。废弃物处置需符合当地危险化学品管理法规。

注：本产品仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。具体实验方案建议参考文献报道的优化条件。