

2-(Methylthio)pyrimidin-4(3H)-one

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(Methylthio)pyrimidin-4(3H)-one
产品目录号	
CAS 号	5751-20-2
分子式	C ₅ H ₆ N ₂ O ₂ S
分子量	142.179
纯度	>96%

产品说明

2-(Methylthio)pyrimidin-4(3H)-one 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶粉末，化学名称为 2-(甲硫基)嘧啶-4(3H)-酮，CAS 号为 5751-20-2，分子式 C₅H₆N₂O₂S，分子量 142.179。纯度经 HPLC 验证大于 96%，具有嘧啶酮环结构及甲硫基侧链，易溶于有机溶剂如 DMSO 和甲醇，微溶于水。其熔点为 145-148° C，需避光保存以避免光解反应。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是嘧啶类衍生物的关键中间体，通过参与核苷酸类似物合成，在 RNA 和 DNA 代谢研究中具有重要作用。甲硫基的引入增强了其作为硫代核苷前体的反应活性，使其成为修饰核酸结构、研究酶抑制机制（如胸苷酸合成酶）的重要工具分子。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发中，本品用于合成抗病毒（如 HIV）和抗肿瘤药物（如 5-氟尿嘧啶衍生物）。农业化学领域则应用于杀虫剂和除草剂的开发。此外，它可作为荧光标记物的合成原料，或用于研究蛋白质-核酸相互作用的基础科研项目。

4. 储存条件与使用建议

建议在-20° C、干燥惰性气体环境下长期储存，短期使用可置于 4° C 避光环境。开封后需充氮密封，防止氧化。实验操作应在通风橱中进行，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解时优先选用 DMSO，配制成 10mM 母液后分装冻存。

5. 质量控制与安全信息

批次产品均通过核磁共振（¹H NMR）和质谱（MS）验证结构，HPLC 检测杂质含量低于 4%。根据 GHS 分类，本品具刺激性（H315-H319），操作需佩戴护目镜及防尘口罩。若意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地危险化学品法规。

(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预实验验证。)