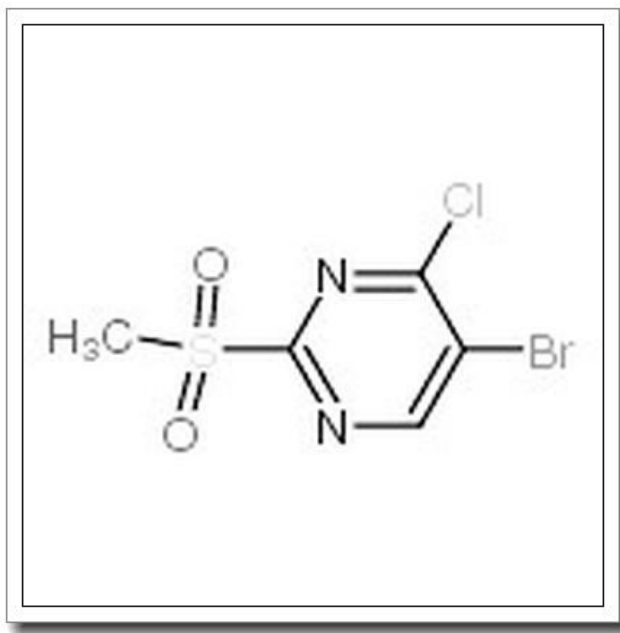


4-氯-5-溴-2-甲磺酰基嘧啶

5-bromo-4-chloro-2-methylsulfonylpyrimidine



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-bromo-4-chloro-2-methylsulfonylpyrimidine
中文名称	4-氯-5-溴-2-甲磺酰基嘧啶
CAS 号	79091-24-0
分子式	C ₅ H ₄ BrClN ₂ O ₂ S
分子量	271.519
纯度	>96%

产品说明

4-氯-5-溴-2-甲磺酰基嘧啶产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 5-溴-4-氯-2-甲磺酰基嘧啶 (5-bromo-4-chloro-2-methylsulfonylpyrimidine), CAS 号为 79091-24-0, 分子式为 $C_5H_4BrClN_2O_2S$, 分子量 271.519。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 >96%, 属于嘧啶类衍生物, 具有显著的电子亲和性和反应活性。其结构中的溴、氯取代基及甲磺酰基赋予其独特的亲电特性, 适用于多种有机合成反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为嘧啶骨架的卤代衍生物, 该化合物在生物化学领域主要作为中间体参与核苷酸类似物的合成。其甲磺酰基可作为良好的离去基团, 在亲核取代反应中表现出高效性, 而溴和氯的引入可进一步调控分子极性与空间位阻, 使其成为修饰 DNA/RNA 碱基或开发抗病毒、抗肿瘤药物的重要砌块。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于医药研发、农药合成及材料科学领域。在医药化学中, 用于构建抗代谢类药物的核心嘧啶环结构; 在农药领域, 可作为杀菌剂或除草剂的活性组分前体; 在材料科学中, 可用于合成光电功能材料的共轭单元。具体实验场景包括 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等交叉偶联反应。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、避光、干燥条件下长期储存, 短期使用可置于 $2-8^{\circ}C$ 环境。开封后需充入惰性气体保护, 避免吸湿分解。使用时应在通风橱中操作, 佩戴防护手套及护目镜。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜 (DMSO), 微溶于甲醇, 不溶于水, 推荐以无水有机溶剂配制母液。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 >96%, 重金属含量 <10ppm, 符合生化试剂标准。安全数据表明其具有刺激性, 可能引起皮肤、眼睛黏膜损伤, 操作时应避免直接接触。废弃

物需按危险化学品处理规范处置。提供 MSDS 及 COA 随货文件, 详细毒理学数据可参见第 11 部分 (GHS 分类: H315-H319-H335)。