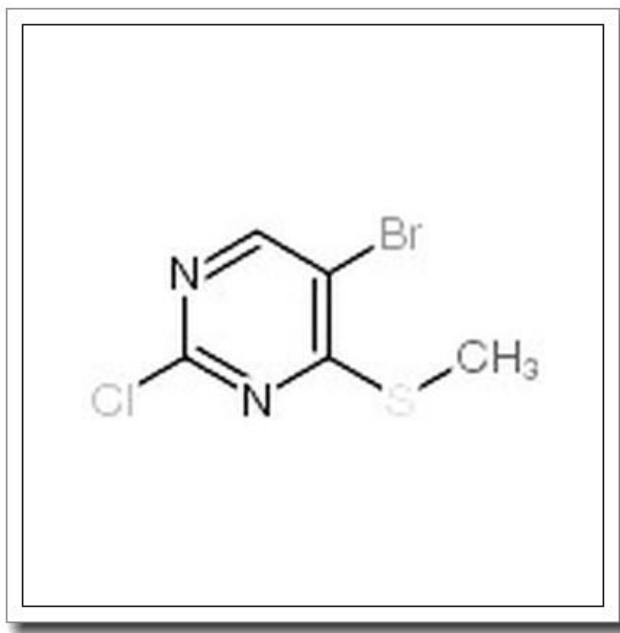


5-溴-2-氯-4-(甲硫基)嘧啶

5-Bromo-2-chloro-4-(methylthio)pyrimidine



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-Bromo-2-chloro-4-(methylthio)pyrimidine
中文名称	5-溴-2-氯-4-(甲硫基)嘧啶
CAS 号	59549-51-8
分子式	C ₅ H ₄ BrClN ₂ S
分子量	239.521
纯度	>96%

产品说明

5-溴-2-氯-4-(甲硫基)嘧啶产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-溴-2-氯-4-(甲硫基)嘧啶 (CAS 号: 59549-51-8) 是一种重要的嘧啶类衍生物, 分子式为 $C_5H_4BrClN_2S$, 分子量为 239.521。该化合物为白色至淡黄色结晶或粉末, 纯度高于 96%, 具有独特的硫醚结构和卤素取代基, 使其在有机合成中表现出较高的反应活性。其化学性质稳定, 但在强氧化剂或强酸条件下可能发生分解。

2. 生物化学功能与重要性

作为嘧啶类化合物的修饰衍生物, 该产品可通过嘧啶环上的溴、氯和甲硫基位点参与亲核取代、偶联反应等关键化学转化。其在药物化学中尤为重要, 是合成抗病毒、抗肿瘤药物及激酶抑制剂的重要中间体。甲硫基的引入可增强化合物的脂溶性, 进而影响其生物利用度和细胞膜穿透能力。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于医药研发和有机合成领域。在医药中间体合成中, 常用于构建含嘧啶骨架的靶向药物分子, 如 EGFR 抑制剂或核苷类似物。此外, 在材料科学中可用于制备功能化配体或光电材料前体。具体实验用途包括 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等交叉偶联反应。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、避光环境中, 储存温度 2-8°C 以延长稳定性。开封后需充入惰性气体保护, 避免吸湿或氧化。使用时应在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和氯仿, 微溶于水, 可根据实验需求选择合适的溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, MS 和 NMR 验证结构准确性。安全数据表明其具有刺激性, 操作时需佩戴防护手套、护目镜及实验服。若不慎接触眼睛, 应立即用大

量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地化学品管理法规，建议通过专业危废机构处置。

（注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件进一步优化。）