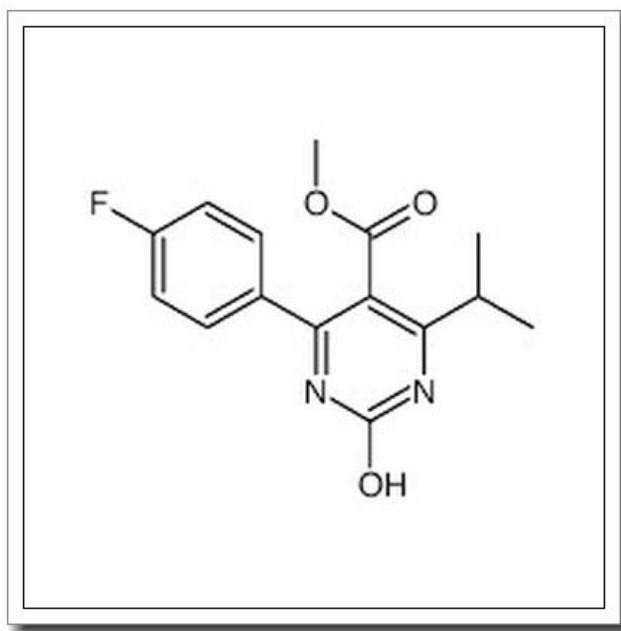


methyl 4-(4-fluorophenyl)-2-oxo-6-propan-2-yl-1H-pyrimidine-5-carboxylate

methyl 4-(4-fluorophenyl)-2-oxo-6-propan-2-yl-1H-pyrimidine-5-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 4-(4-fluorophenyl)-2-oxo-6-propan-2-yl-1H-pyrimidine-5-carboxylate
中文名称	methyl 4-(4-fluorophenyl)-2-oxo-6-propan-2-yl-1H-pyrimidine-5-carboxylate
CAS 号	488798-37-4
分子式	C ₁₅ H ₁₅ FN ₂ O ₃
分子量	290.29
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 methyl 4-(4-fluorophenyl)-2-oxo-6-propan-2-yl-1H-pyrimidine-5-carboxylate，分子式 C₁₅H₁₅FN₂O₃，分子量 290.29，CAS 号 488798-37-4。其结构中含氟苯基和嘧啶酮骨架，具有显著的疏水性和稳定性。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，符合生化试剂标准。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为嘧啶类衍生物，可通过抑制特定酶活性干扰核苷酸代谢，在抗病毒和抗肿瘤研究中表现出潜在活性。其氟原子修饰增强了细胞膜穿透性，而酯基团提供了进一步结构修饰的位点，是药物先导化合物优化的重要中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域：

- 作为抗 HIV 和 HCV 药物的关键中间体
- 用于构建激酶抑制剂的核心骨架
- 在放射性标记探针合成中作为前体化合物

实验室用途包括体外酶活性测试、细胞水平药效评估及结构-活性关系（SAR）研究。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃、避光、干燥的惰性气体环境中，有效期 24 个月。使用时需在干燥氮气保护下操作，避免接触强氧化剂。建议溶解于 DMSO（浓度 ≤10mM）后分装冻存，反复冻融不超过 3 次。

5. 质量控制与安全信息

经 GC-MS 和 NMR 验证结构，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据：

- 危害标识：H302（吞咽有害）
- 防护措施：佩戴 N95 口罩及丁腈手套

- 应急处理: 皮肤接触时立即用聚乙烯二醇 400 冲洗

运输分类: UN2811 6.1 类危险品, 需提供 MSDS 随货。

注: 本品仅限科研使用, 禁止用于人体或食品加工。建议在通风橱中操作, 废弃物按有机卤化物规范处置。