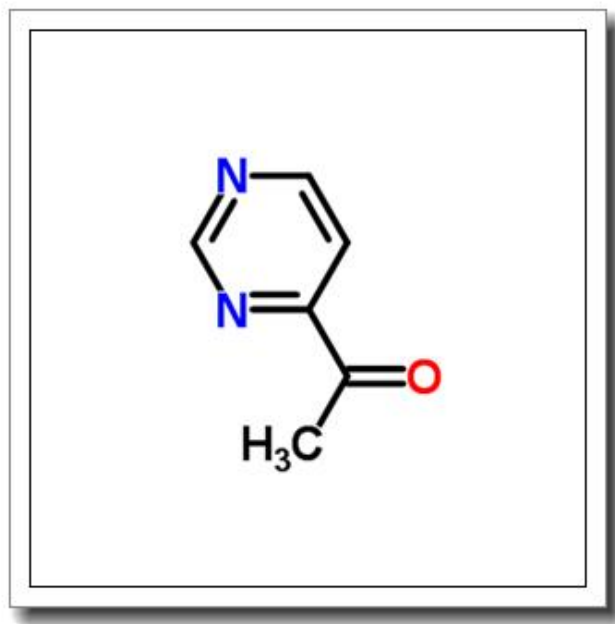


# 1-(嘧啶-4-基)乙酮

*1-pyrimidin-4-ylethanone*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	1-pyrimidin-4-ylethanone
中文名称	1-(嘧啶-4-基)乙酮
CAS 号	39870-05-8
分子式	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O
分子量	122.125
纯度	≥ 96%

## 产品说明

### 1-(嘧啶-4-基)乙酮产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

1-(嘧啶-4-基)乙酮 (英文名: 1-pyrimidin-4-ylethanone) 是一种有机化合物, 化学式为  $C_6H_6N_2O$ , 分子量为 122.125, CAS 号为 39870-05-8。本品为白色至类白色结晶或粉末, 纯度  $\geq 96\%$ , 具有典型的嘧啶环结构特征, 同时含有一个乙酰基团, 使其兼具芳香性和酮类化合物的反应活性。该化合物易溶于有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO, 微溶于水, 需在干燥避光条件下保存。

#### 2. 生物化学功能与重要性

1-(嘧啶-4-基)乙酮是嘧啶类衍生物的重要中间体, 嘧啶环作为核酸碱基的核心结构, 使其在药物化学和生物化学领域具有广泛的应用价值。该化合物可通过进一步修饰参与核苷类似物、激酶抑制剂及抗菌药物的合成, 是构建复杂生物活性分子的关键砌块。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药研发和有机合成领域。在药物开发中, 常用于抗病毒、抗肿瘤及抗感染药物的先导化合物优化; 在材料科学中, 可作为配体或功能单体参与金属有机框架 (MOF) 材料的制备。此外, 其衍生物在农药和精细化工中也有潜在应用。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议储存于  $2-8^{\circ}C$  的干燥环境中, 避免光照和潮湿。开封后需充惰性气体 (如氮气) 保护, 以延长稳定性。使用时应在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解推荐使用无水有机溶剂, 若需水溶可加入适量助溶剂 (如 DMSO)。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ , 同时通过核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 验证结构。安全数据表明, 该化合物对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时需佩戴防护手套和护目镜。若不慎接触, 应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地化学品管理法规。

(注: 以上信息基于实验室环境下的测试结果, 实际应用需结合具体实验条件调整。)