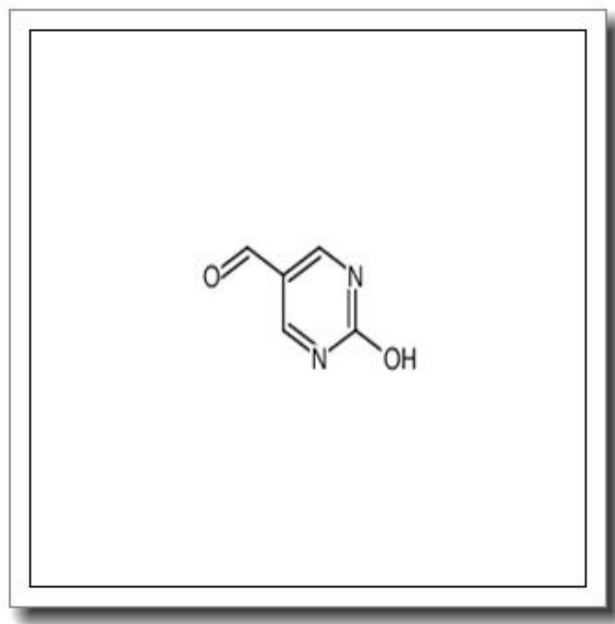


1,2-二氢-2-氧代-5-嘧啶羧醛

2-oxo-1H-pyrimidine-5-carbaldehyde



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-oxo-1H-pyrimidine-5-carbaldehyde
中文名称	1,2-二氢-2-氧代-5-嘧啶羧醛
CAS 号	166757-62-6
分子式	C ₅ H ₄ N ₂ O ₂
分子量	124.097
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

2-oxo-1H-pyrimidine-5-carbaldehyde (1,2-二氢-2-氧代-5-嘧啶羧醛) 是一种嘧啶类衍生物, 化学式为 $C_5H_4N_2O_2$, 分子量为 124.097。该化合物为白色至淡黄色结晶粉末, CAS 号为 166757-62-6, 纯度 $\geq 96\%$ 。其结构中包含嘧啶环和醛基, 具有较高的反应活性, 尤其在亲核加成反应中表现突出。该物质易溶于极性有机溶剂如 DMSO 和 DMF, 微溶于水, 需避光保存以避免醛基氧化。

2. 生物化学功能与重要性

作为嘧啶类化合物, 2-oxo-1H-pyrimidine-5-carbaldehyde 是核酸代谢途径中的重要中间体, 可参与嘌呤和嘧啶的生物合成。其醛基特性使其成为修饰核苷酸或蛋白质的潜在交联剂, 在生物共轭化学中具有广泛应用。此外, 该化合物可作为药物研发中的关键砌块, 用于合成抗病毒、抗肿瘤等活性分子。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发和有机合成领域。在药物化学中, 它是构建抗 HIV 和抗癌先导化合物的核心骨架。在材料科学中, 可用于制备荧光标记物或高分子材料的功能性单体。实验室中常作为醛基化试剂, 用于合成杂环化合物或金属有机框架 (MOFs)。具体应用包括但不限于: 核苷类似物修饰、酶抑制剂开发及生物传感器设计。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光密封保存, 长期储存需充惰性气体保护。开封后应尽快使用, 避免反复冻融。使用时需在干燥惰性气氛 (如氮气) 下操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解推荐使用无水 DMSO, 配制溶液后建议 24 小时内使用完毕。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 批次间质量稳定。MS 和 NMR 数据可提供验证。

安全提示: 该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性, 操作应在通风橱中进行。若不慎

接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。详细安全数据参见随货 MSDS 报告。