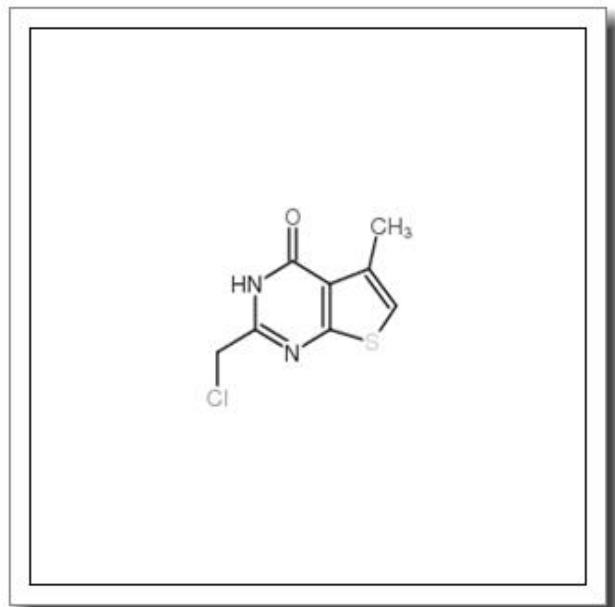


2-(氯甲基)-5-甲基噻吩[2,3-D]嘧啶-4(3H)-酮

2-(chloromethyl)-5-methyl-3H-thieno[2,3-d]pyrimidin-4-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(chloromethyl)-5-methyl-3H-thieno[2,3-d]pyrimidin-4-one
中文名称	2-(氯甲基)-5-甲基噻吩[2,3-D]嘧啶-4(3H)-酮
CAS 号	568577-81-1
分子式	C ₈ H ₇ ClN ₂ O ₂ S
分子量	214.672
纯度	≥96%

产品说明

2-(氯甲基)-5-甲基噻吩[2,3-D]嘧啶-4(3H)-酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 2-(chloromethyl)-5-methyl-3H-thieno[2,3-d]pyrimidin-4-one，分子式 C₈H₇C₁N₂O₂S，分子量 214.672，CAS 号 568577-81-1。其结构中包含噻吩并嘧啶酮母核和活性氯甲基官能团，赋予其独特的反应活性。纯度 ≥96% (HPLC)，易溶于二甲基亚砷 (DMSO) 和部分有机溶剂，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为杂环化合物衍生物，该分子可通过氯甲基位点进行亲核取代反应，是构建复杂生物活性分子的关键中间体。其噻吩嘧啶酮结构常见于抗肿瘤、抗病毒药物的药效团设计中，特别在激酶抑制剂开发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药研发：用于合成小分子靶向药物，尤其是蛋白激酶抑制剂类抗肿瘤候选化合物。
- 3.2 材料科学：作为有机半导体材料的前体，应用于光电功能材料开发。
- 3.3 学术研究：在有机合成方法学中作为模板分子研究杂环化合物的修饰反应。

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存条件：需避光密封保存于 -20℃ 干燥环境中，长期储存建议充氮保护。
- 4.2 使用建议：开封后需在干燥器内平衡至室温再称量，避免吸湿。建议在通风橱中操作，反应溶剂优先选择无水级。

5. 质量控制与安全信息

- 5.1 质量控制：通过 HPLC、NMR 和质谱进行批次检测，符合 USP 标准。
- 5.2 安全信息：属于刺激性化学品，皮肤接触可能引起过敏 (GHS 分类: Skin Irrit. 2)。操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩，若不慎接触眼部应立即用大量清水冲洗并就医。

(注: 本产品仅限科研用途, 不可用于人体或食品相关领域。)