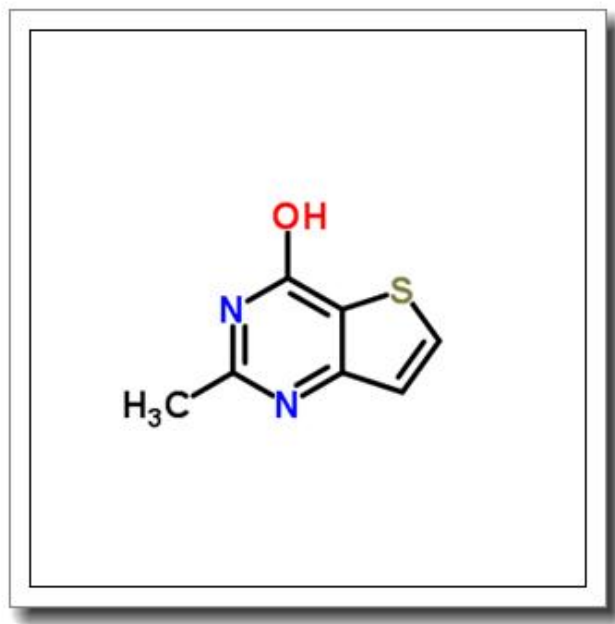


2-甲基噻吩并[3,2-d]嘧啶-4(3H)-酮

2-methyl-1H-thieno[3,2-d]pyrimidin-4-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-methyl-1H-thieno[3,2-d]pyrimidin-4-one
中文名称	2-甲基噻吩并[3,2-d]嘧啶-4(3H)-酮
CAS 号	18678-13-2
分子式	C ₇ H ₆ N ₂ O ₂ S
分子量	166.2
纯度	≥96%

产品说明

2-甲基噻吩并[3, 2-d]嘧啶-4(3H)-酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 2-methyl-1H-thieno[3, 2-d]pyrimidin-4-one, CAS 号为 18678-13-2, 是一种含硫氮杂环化合物。其分子式为 $C_7H_6N_2OS$, 分子量为 166.2, 纯度 $\geq 96\%$ 。该化合物为白色至类白色结晶粉末, 具有噻吩并嘧啶酮的特征结构, 兼具芳香性和杂环化合物的反应活性, 可溶于常见有机溶剂如 DMSO 和甲醇, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为噻吩并嘧啶酮类衍生物, 该化合物是构建复杂生物活性分子的关键中间体。其结构中的嘧啶酮环和噻吩环可参与氢键形成和 $\pi-\pi$ 堆积作用, 使其在药物化学中成为重要的药效团。该分子在激酶抑制剂设计和核苷类似物合成中具有特殊价值, 尤其在抗肿瘤和抗病毒药物研发领域受到广泛关注。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于医药研发和有机合成领域。在药物开发中, 常用于构建激酶抑制剂的核心骨架, 如 EGFR、CDK 等靶点抑制剂的前体合成。此外, 还可作为荧光探针的修饰基团或金属配位化学的配体。在学术研究中, 用于探索杂环化合物的构效关系及新型抗癌药物的作用机制。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光保存, 长期储存需充惰性气体保护。开封后应密封防潮, 避免反复冻融。使用时需在干燥环境下操作, 建议佩戴防护手套和护目镜。溶解时可先尝试 DMSO 作为溶剂, 后续用缓冲液稀释至工作浓度。实验废料应按危险化学品规范处置。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 批次间稳定性良好。MS 和 NMR 谱图数据可随货提供。安全警示: 可能引起眼睛和皮肤刺激, 吸入或误食有害。操作时应遵守实验室

安全规程，确保通风良好。如接触皮肤，立即用大量清水冲洗并就医。详细安全数据参见随附的 MSDS 文件。

本产品仅供科研用途，不适用于临床或食品领域。使用者应具备专业化学知识并采取适当防护措施。