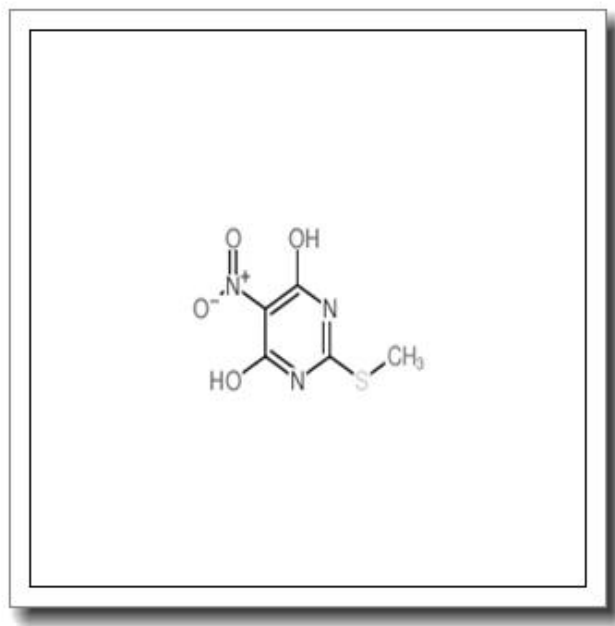


2-(甲基硫代)-5-硝基嘧啶-4,6-二醇

4-hydroxy-2-methylsulfanyl-5-nitro-1H-pyrimidin-6-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-hydroxy-2-methylsulfanyl-5-nitro-1H-pyrimidin-6-one
中文名称	2-(甲基硫代)-5-硝基嘧啶-4,6-二醇
CAS 号	1979-97-1
分子式	C ₅ H ₅ N ₃ O ₄ S
分子量	203.176
纯度	≥96%

产品说明

4-羟基-2-甲硫基-5-硝基-1H-嘧啶-6-酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 4-hydroxy-2-methylsulfanyl-5-nitro-1H-pyrimidin-6-one (CAS 号 1979-97-1)，中文命名为 2-(甲基硫代)-5-硝基嘧啶-4,6-二酮，是一种具有硝基和硫代甲基取代基的嘧啶酮衍生物。其分子式为 C₅H₅N₃O₄S，分子量 203.176，纯度 ≥96%，常温下呈淡黄色至黄色结晶粉末。该化合物在极性有机溶剂（如 DMSO、甲醇）中具有中等溶解性，水溶性较低，需注意其光敏感性和在强酸强碱条件下的不稳定性。

2. 生物化学功能与重要性

作为嘧啶类化合物，该分子通过硝基和硫代甲基的协同作用表现出独特的生物活性。其结构中的硝基可作为电子受体参与氧化还原反应，而硫代甲基则增强了分子与生物受体的亲和力。研究表明，该类衍生物在核酸代谢调控中具有潜在作用，可能通过干扰嘧啶碱基的合成途径影响细胞增殖，因此在抗代谢药物研发领域备受关注。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于以下领域：

- (1) 医药中间体：用于合成抗肿瘤、抗病毒药物的活性成分，特别是针对胸苷酸合成酶抑制剂的开发。
- (2) 生化研究：作为酶抑制剂研究的工具化合物，用于探究嘧啶代谢相关酶（如二氢嘧啶脱氢酶）的作用机制。
- (3) 农业化学：可作为新型杀菌剂或植物生长调节剂的先导化合物进行结构优化。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C、避光、干燥条件下密封保存，长期储存需充惰性气体保护。使用时需在惰性气氛（如氮气）下操作，避免接触强氧化剂。溶解推荐使用预脱气的

DMSO，配制溶液建议现配现用。实验操作应在通风橱中进行，并佩戴防护手套及护目镜。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，批次间差异控制在 $\pm 1\%$ 以内。MS 和 NMR 谱图数据可随 COA 提供。安全警示：该化合物可能引起皮肤刺激（GHS 分类 Category 2），吸入或食入有害。应急处理时需立即用大量清水冲洗接触部位，如误食应就医并携带物质安全数据表（MSDS）。废弃物处置需符合当地危险化学品管理法规。

注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件进一步验证。产品规格可能因技术改进调整，请以最新 COA 为准。