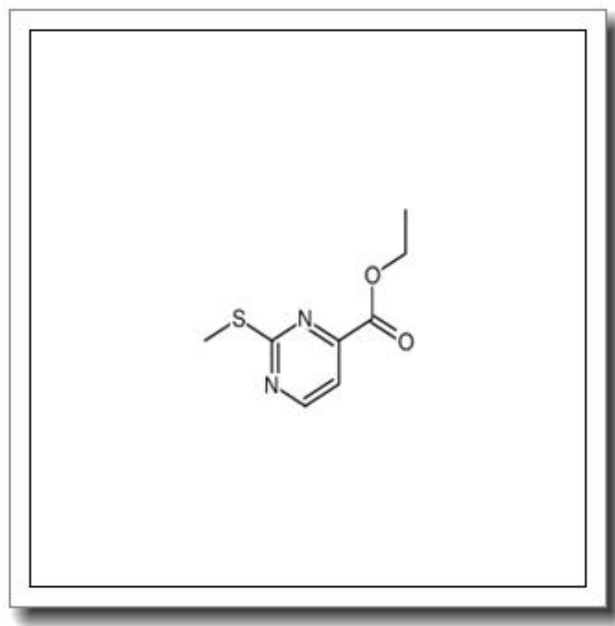


2-(甲硫基)嘧啶-4-羧酸乙酯

ethyl 2-methylsulfanylpyrimidine-4-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 2-methylsulfanylpyrimidine-4-carboxylate
中文名称	2-(甲硫基)嘧啶-4-羧酸乙酯
CAS 号	250726-39-7
分子式	C ₈ H ₁₀ N ₂ O ₂ S
分子量	198.242
纯度	≥96%

产品说明

2-(甲硫基)嘧啶-4-羧酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-(甲硫基)嘧啶-4-羧酸乙酯 (ethyl 2-methylsulfanylpyrimidine-4-carboxylate) 是一种嘧啶类有机化合物, CAS 号为 250726-39-7, 分子式为 $C_8H_{10}N_2O_2S$, 分子量为 198.242。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和酯基官能团, 其甲硫基 (-SCH₃) 赋予分子独特的亲脂性和反应活性。该化合物在常温下稳定, 易溶于有机溶剂如乙醇、二甲基亚砜 (DMSO), 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为嘧啶衍生物, 该化合物是合成多种生物活性分子的关键中间体。其嘧啶环结构可参与核酸类似物构建, 而酯基和甲硫基为后续修饰 (如水解、取代反应) 提供了反应位点。在药物化学中, 此类结构常见于抗病毒、抗肿瘤化合物的研发, 例如作为蛋白激酶抑制剂的合成前体。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药和农药中间体合成领域。具体用途包括:

- 医药研发: 用于构建抗肿瘤药物 (如酪氨酸激酶抑制剂) 和抗感染药物的核心骨架。
- 农药化学: 作为杀菌剂或杀虫剂的嘧啶类衍生物合成原料。
- 材料科学: 参与制备功能性有机配体或光电材料。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 避光、防潮, 建议温度 2-8°C 冷藏保存。长期储存需充惰性气体保护。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解建议选用无水乙醇或 DMSO, 配制后溶液建议现配现用。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 重金属含量符合 ACS 标准。安全数据如下:

- 危险标识: 可能引起皮肤刺激 (H315) 和眼睛刺激 (H319)。
- 防护措施: 佩戴防护手套、护目镜和防尘口罩, 接触后立即用清水冲洗。
- 废弃物处理: 按危险化学品规范处置, 不可直接排入环境。

本产品仅供科研或工业用途, 不适用于临床或食品领域。具体应用需进一步验证其安全性和有效性。