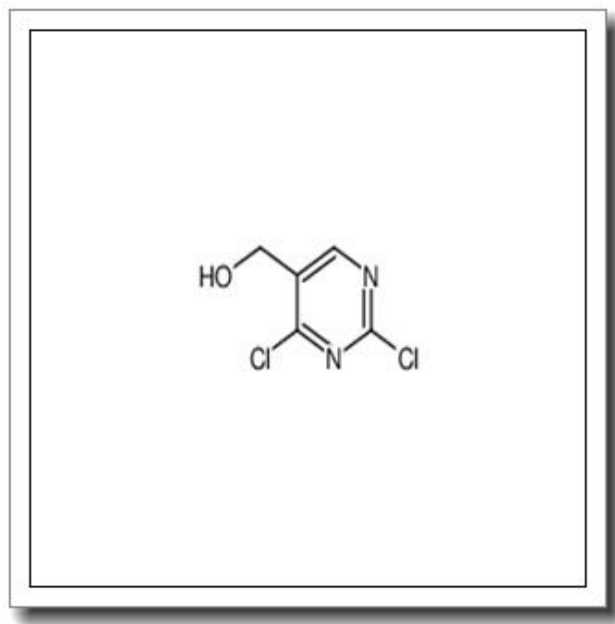


2,4-二氯-5-嘧啶甲醇

(2,4-dichloropyrimidin-5-yl)methanol



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2,4-dichloropyrimidin-5-yl)methanol
中文名称	2,4-二氯-5-嘧啶甲醇
CAS 号	1346537-23-2
分子式	C ₅ H ₄ Cl ₂ N ₂ O
分子量	179.004
纯度	≥96%

产品说明

2,4-二氯-5-嘧啶甲醇产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2,4-二氯-5-嘧啶甲醇 ((2,4-dichloropyrimidin-5-yl)methanol) 是一种重要的嘧啶类有机化合物, 化学式为 $C_5H_4Cl_2N_2O$, 分子量 179.004, CAS 号为 1346537-23-2。本品为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有典型的芳香杂环结构, 其嘧啶环上的 2 位和 4 位氯原子赋予其较高的反应活性, 而 5 位羟甲基则为后续衍生化提供了关键修饰位点。该化合物在极性有机溶剂 (如甲醇、乙醇、DMSO) 中具有良好的溶解性, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为嘧啶衍生物, 该化合物是构建核苷类似物、药物活性分子及功能材料的重要中间体。其结构中的氯原子可通过亲核取代反应与胺类、硫醇类等试剂高效结合, 而羟甲基可进一步氧化为醛基或羧基, 或参与酯化、醚化反应。这类特性使其在抗病毒药物 (如 HIV 蛋白酶抑制剂)、抗肿瘤剂及农药活性成分的研发中具有不可替代的作用。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药、农药及材料科学领域。在医药研发中, 常用于合成嘧啶类抗代谢药物或激酶抑制剂的核心骨架; 在农药化学中, 可作为杀菌剂或除草剂的中间体; 在材料领域, 可用于制备功能化高分子或配位化合物。具体实验场景包括:

- 通过 Suzuki 偶联反应构建双嘧啶结构
- 作为前体合成 5-甲酰基嘧啶衍生物
- 参与点击化学修饰以引入生物活性基团

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、避光、干燥惰性气体 (如氮气) 环境下长期储存, 短期使用可存放于 $2-8^{\circ}C$ 。开封后需充氮密封, 防止吸湿降解。使用时应佩戴防护手套、护目镜

及防尘口罩，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解推荐使用无水 DMSO 或乙醇，溶液现配现用，避免长时间暴露于空气中。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，水分含量 $\leq 0.5\%$ ，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明，其急性毒性 (LD50) 为大鼠经口 >500 mg/kg，属于刺激性化学品。操作时需通风橱中进行，若接触皮肤需立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物应作为有害化学废物处理，遵守当地环保法规。

注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验方案进一步验证。