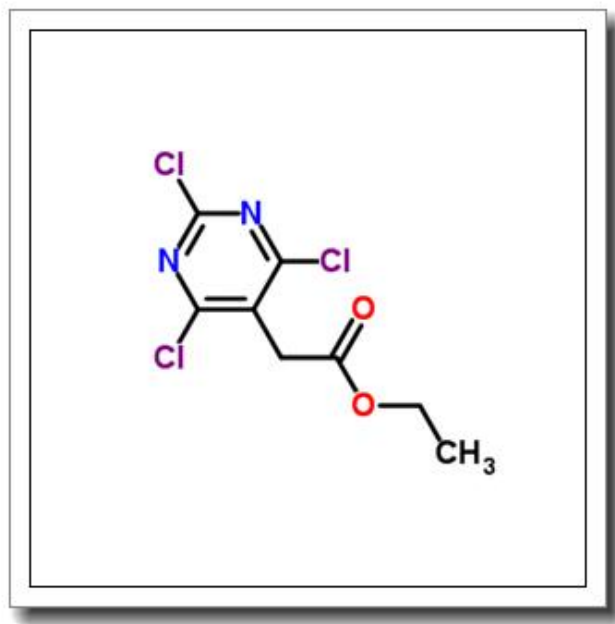


(2,4,6-三氯-嘧啶-5-基)-乙酸乙酯

ethyl 2-(2,4,6-trichloropyrimidin-5-yl)acetate



产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 2-(2,4,6-trichloropyrimidin-5-yl)acetate
中文名称	(2,4,6-三氯-嘧啶-5-基)-乙酸乙酯
CAS 号	889944-72-3
分子式	C ₈ H ₇ Cl ₃ N ₂ O ₂
分子量	269.512
纯度	≥96%

产品说明

2, 4, 6-三氯嘧啶-5-基乙酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 ethyl 2-(2,4,6-trichloropyrimidin-5-yl)acetate, 中文名为 2,4,6-三氯嘧啶-5-基乙酸乙酯, CAS 号为 889944-72-3。其分子式为 $C_8H_7Cl_3N_2O_2$, 分子量为 269.512, 纯度 $\geq 96\%$ 。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 具有嘧啶环结构特征, 三氯取代基赋予其高反应活性, 酯基则增强了脂溶性。常温下稳定, 易溶于有机溶剂如二氯甲烷、乙酸乙酯, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为嘧啶类衍生物, 该化合物是合成多种生物活性分子的关键中间体。其结构中的三氯嘧啶环可通过亲核取代反应引入氨基、烷氧基等官能团, 而乙酸乙酯侧链可进一步水解或衍生化。在药物化学中, 此类结构常用于构建抗病毒、抗肿瘤药物的核心骨架, 例如核苷类似物或激酶抑制剂。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药和农药研发领域。在医药方向, 主要用于合成抗 HIV 药物 (如非核苷类逆转录酶抑制剂) 及抗代谢类抗癌药物的前体。在农药领域, 可作为杀菌剂或除草剂的中间体。此外, 在材料科学中可用于制备功能化高分子单体。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20°C 至 4°C 的干燥环境中, 避免光照和潮湿。开封后需充惰性气体保护。使用时应佩戴防护手套、护目镜, 在通风橱中操作。溶解时优先选用无水 DMF 或 THF, 反应温度建议控制在 $0-25^{\circ}\text{C}$ 以避免副反应。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 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, 该物质对眼睛和皮肤有刺激性, 吸入或误食可能造成呼吸道和消化道损伤。操作时需遵守 GHS 分类: H302-H315-H319。泄漏处理需用惰性吸附材料收集, 废料按危险化学品规范处置。

注：具体实验方案请结合目标产物结构咨询专业技术支持，本说明不替代安全数据表（SDS），使用前务必查阅完整安全信息。