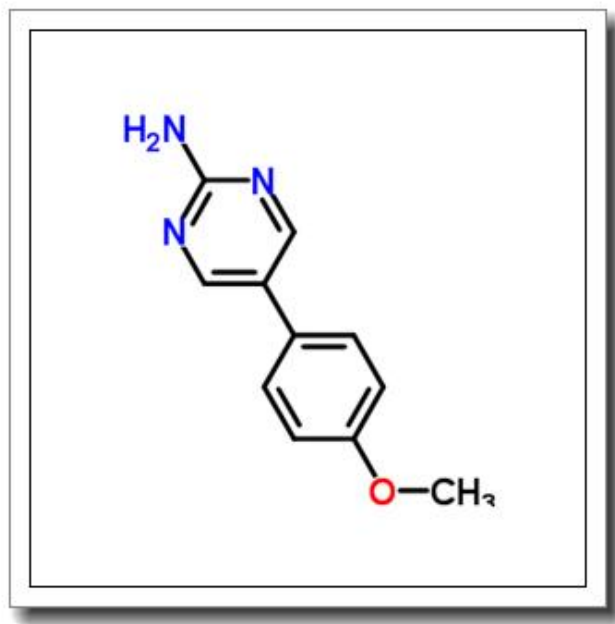


5-(4-甲氧基苯基)嘧啶-2-胺

5-(4-Methoxyphenyl)pyrimidin-2-amine



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-(4-Methoxyphenyl)pyrimidin-2-amine
中文名称	5-(4-甲氧基苯基)嘧啶-2-胺
CAS 号	31408-47-6
分子式	C ₁₁ H ₁₁ N ₃ O
分子量	201.225
纯度	≥96%

产品说明

5-(4-甲氧基苯基)嘧啶-2-胺产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-(4-甲氧基苯基)嘧啶-2-胺 (CAS 号: 31408-47-6) 是一种有机杂环化合物, 分子式为 $C_{11}H_{11}N_3O$, 分子量 201.225。该化合物由嘧啶环与对甲氧基苯基通过碳键连接而成, 呈现白色至类白色结晶粉末状, 纯度 $\geq 96\%$ 。其结构中嘧啶环的氨基 ($-NH_2$) 和甲氧基 ($-OCH_3$) 赋予其独特的亲核性和电子效应, 使其在有机合成及药物化学中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

作为嘧啶类衍生物, 该化合物可通过参与氢键形成和 $\pi-\pi$ 堆积作用, 与生物大分子 (如 DNA 或蛋白质) 特异性结合。其结构中的甲氧基可调节脂溶性和膜穿透性, 而嘧啶胺基团常作为氢键供体或受体, 在酶抑制或受体拮抗中发挥作用。此类结构单元广泛存在于抗肿瘤、抗病毒及激酶抑制剂类药物的活性分子中。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药中间体合成, 尤其作为构建 EGFR 抑制剂、CDK 抑制剂等靶向药物的关键片段。在材料科学领域, 可用作有机发光二极管 (OLED) 的电子传输材料前体。此外, 在学术研究中常用于探索嘧啶类化合物的构效关系, 或作为标记物用于生物共轭实验。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 的干燥环境中, 避免光照及潮湿。开封后需充惰性气体 (如氮气) 保护以延长稳定性。使用时应在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明其易溶于 DMSO、甲醇, 微溶于水, 建议根据实验需求选择适当溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, MS 和 NMR 验证结构一致性。安全数据表明, 其急性

毒性 (LD50) 属中等危害类别, 操作时需佩戴防护手套、护目镜及实验服。如发生接触, 立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地化学品管理法规。

(注: 本说明基于现有研究数据编制, 具体应用需进一步实验验证。)