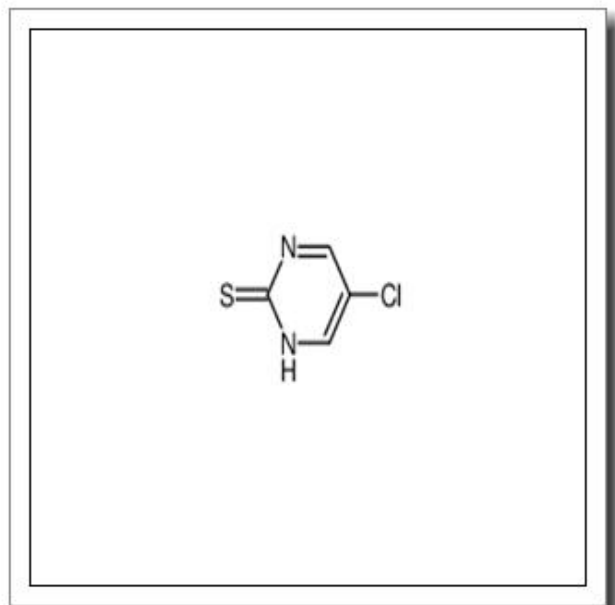


5-Chloropyrimidine-2-thiol

5-Chloropyrimidine-2-thiol



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-Chloropyrimidine-2-thiol
中文名称	5-Chloropyrimidine-2-thiol
CAS 号	34772-97-9
分子式	C ₄ H ₃ ClN ₂ S
分子量	146.598
纯度	≥96%

产品说明

5-氯嘧啶-2-硫醇产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-氯嘧啶-2-硫醇 (5-Chloropyrimidine-2-thiol) 是一种含硫杂环化合物，化学式为 $C_4H_3ClN_2S$ ，分子量 146.598，CAS 号为 34772-97-9。本品为白色至淡黄色结晶性粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，具有嘧啶环的典型芳香性及硫醇基团的反应活性。其结构中氯原子与硫醇基团的协同作用使其成为有机合成中的重要中间体，尤其在构建杂环化合物时表现出高选择性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物通过硫醇基团参与巯基-二硫键交换反应，同时氯原子可作为亲电位点与亲核试剂反应。在生物化学研究中，其衍生物常用于模拟核酸碱基结构或作为酶抑制剂的核心骨架。其分子特性对研究蛋白质-配体相互作用及药物靶点识别具有独特价值。

3. 主要应用领域与具体用途

作为关键合成砌块，5-氯嘧啶-2-硫醇广泛应用于医药、农药及材料科学领域。在医药研发中，用于构建抗病毒（如 HIV 蛋白酶抑制剂）和抗肿瘤药物的嘧啶类衍生物；在农药化学中，可作为杀菌剂或杀虫剂的活性组分前体；此外，在功能材料领域可用于制备含硫光电材料。

4. 储存条件与使用建议

本品需避光密封保存于干燥惰性环境中，推荐储存温度为 $2-8^{\circ}C$ 。长期存放建议充氮保护以防止氧化。使用时需在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇，水溶性较低，建议根据实验需求选择合适溶剂。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 和 NMR 确保纯度 $\geq 96\%$ ，批次间一致性误差控制在 $\pm 1\%$ 以内。安全数据表明该化合物具有刺激性，操作时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。若不慎接触

眼睛，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地危险化学品管理条例，建议采用专业焚烧法降解。

（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。）