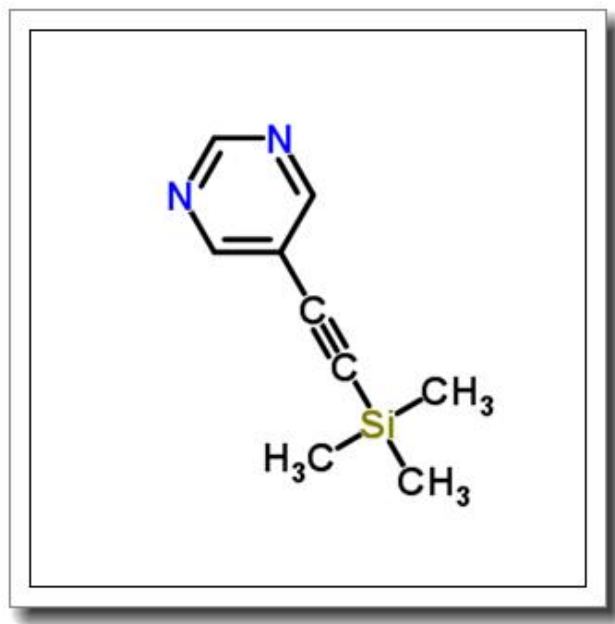


# 5-((三甲基甲硅烷基)乙炔)嘧啶

*trimethyl (2-pyrimidin-5-ylethynyl) silane*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	trimethyl (2-pyrimidin-5-ylethynyl) silane
中文名称	5-((三甲基甲硅烷基)乙炔)嘧啶
CAS 号	216309-28-3
分子式	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> Si
分子量	176.29
纯度	≥96%

## 产品说明

### 5-((三甲基甲硅烷基)乙炔)嘧啶产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

5-((三甲基甲硅烷基)乙炔)嘧啶 (英文名: trimethyl(2-pyrimidin-5-ylethynyl)silane) 是一种有机硅化合物, 化学式为  $C_9H_{12}N_2Si$ , 分子量为 176.29。该化合物 CAS 号为 216309-28-3, 常温下为无色至淡黄色液体或低熔点固体, 纯度通常  $\geq 96\%$ 。其结构特征为嘧啶环通过乙炔基与三甲基硅烷基相连, 兼具芳香杂环的稳定性和硅烷基的反应活性, 在有机合成中具有重要价值。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为嘧啶衍生物, 其分子中的嘧啶环是核酸碱基 (如胞嘧啶、尿嘧啶) 的核心结构, 因此可作为生物活性分子合成的关键中间体。三甲基硅烷基的引入增强了化合物的脂溶性和稳定性, 使其在交叉偶联反应 (如 Sonogashira 反应) 中表现出高反应效率, 广泛应用于药物研发和材料科学领域。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

在医药化学中, 本品常用于构建抗病毒、抗肿瘤药物的嘧啶骨架, 例如用于合成激酶抑制剂或核苷类似物。在材料科学中, 可作为有机半导体材料的合成前体, 或用于修饰金属有机框架 (MOFs) 以调控其光电性能。此外, 其乙炔基团还可通过点击化学 (Click Chemistry) 实现模块化分子组装。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体 (如氮气或氩气) 保护下密封储存, 温度控制在  $2-8^{\circ}C$  以延长保质期。使用前需恢复至室温并避免接触水分, 以防硅烷基水解。操作时应在通风橱中进行, 佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明, 本品易溶于四氢呋喃 (THF)、二氯甲烷等有机溶剂。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测, 确保纯度  $\geq 96\%$ 。安全数据表明, 该化合物可能对眼睛、皮肤有刺激性, 操作时需避免直接接触。如发生泄漏, 应采用惰性吸附材

料处理。废弃物应按照危险化学品规范处置。详细毒理学数据可参考 CAS 号 216309-28-3 的 MSDS 报告。