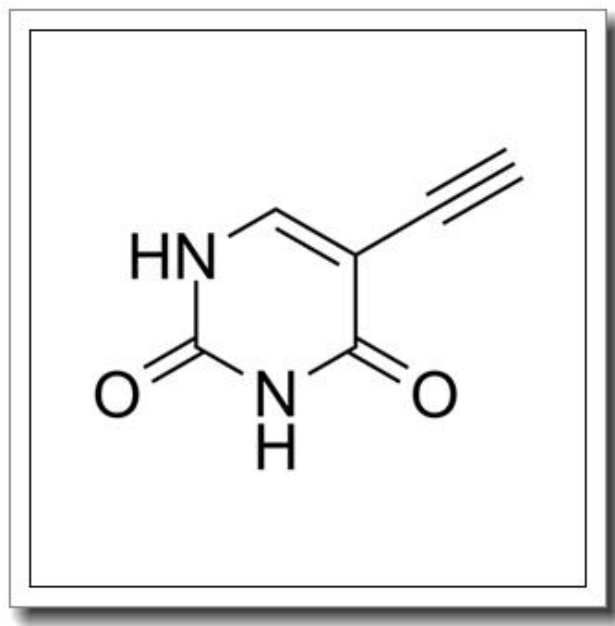


5-乙炔-2,4(1H,3H)-嘧啶二酮(9ci)

5-ethynyl-1H-pyrimidine-2,4-dione



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-ethynyl-1H-pyrimidine-2,4-dione
中文名称	5-乙炔-2,4(1H,3H)-嘧啶二酮(9ci)
CAS 号	59989-18-3
分子式	C ₆ H ₄ N ₂ O ₂
分子量	136.108
纯度	≥ 96%

产品说明

5-乙炔-2,4(1H,3H)-嘧啶二酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-乙炔-2,4(1H,3H)-嘧啶二酮 (CAS 号: 59989-18-3) 是一种嘧啶类衍生物, 化学式为 $C_6H_4N_2O_2$, 分子量 136.108。该化合物为白色至类白色结晶粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有乙炔基和嘧啶二酮的特征结构, 可溶于极性有机溶剂如 DMSO 和甲醇, 但在水中溶解度较低。其化学性质活泼, 易参与炔烃的点击化学反应及嘧啶环的修饰反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为嘧啶碱基类似物, 该化合物可通过乙炔基与生物分子 (如核酸、蛋白质) 进行特异性偶联, 在标记和探针构建中发挥关键作用。其结构特性使其成为研究 DNA/RNA 修饰、核苷酸代谢及酶催化机制的重要工具分子, 尤其在表观遗传学和化学生物学领域具有广泛的应用潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于以下领域:

- 核酸化学: 作为核苷酸类似物前体, 用于合成标记探针或修饰核酸。
- 药物研发: 作为小分子抑制剂或中间体, 用于抗病毒、抗肿瘤药物的开发。
- 材料科学: 通过点击化学制备功能化高分子材料。
- 生物共轭: 与荧光染料或生物素等分子偶联, 用于检测或纯化技术。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、避光、干燥条件下密封保存, 避免反复冻融。使用时需在惰性气体 (如氮气) 保护下操作, 防止氧化或降解。溶解前需平衡至室温, 推荐使用无水 DMSO 配制母液, 并分装保存以延长稳定性。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 验证纯度 $\geq 96\%$, MS 和 NMR 确证结构。操作时需穿戴防护装备 (手

套、护目镜），避免吸入或接触皮肤。如意外暴露，立即用大量清水冲洗并就医。
废弃物需按危险化学品规范处置。

（注：本说明基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件优化。）