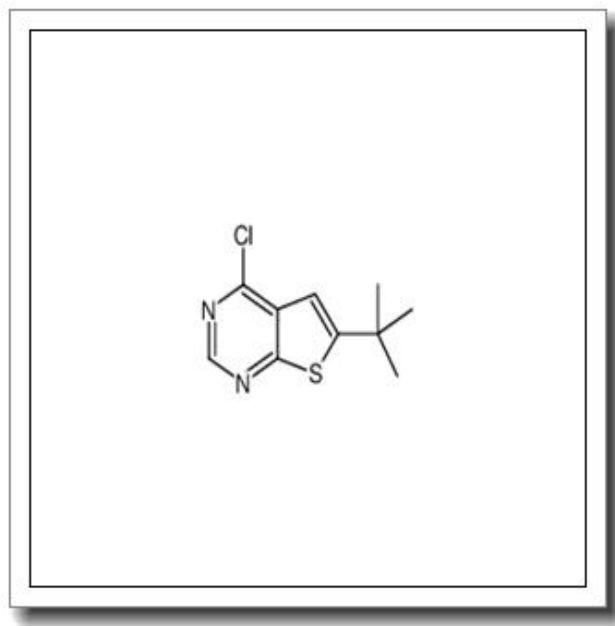


# 6-(叔丁基)-4-氯噻吩并[2,3-d]嘧啶

*6-Tert-Butyl-4-Chlorothieno[2,3-D]Pyrimidine*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	6-Tert-Butyl-4-Chlorothieno[2,3-D]Pyrimidine
中文名称	6-(叔丁基)-4-氯噻吩并[2,3-d]嘧啶
CAS 号	439692-55-4
分子式	C <sub>10</sub> H <sub>11</sub> ClN <sub>2</sub> S
分子量	226.726
纯度	≥96%

## 产品说明

### 6-(叔丁基)-4-氯噻吩并[2,3-d]嘧啶产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 6-Tert-Butyl-4-Chlorothieno[2,3-D]Pyrimidine，CAS 号 439692-55-4，分子式 C<sub>10</sub>H<sub>11</sub>ClN<sub>2</sub>S，分子量 226.726。其结构中包含噻吩并嘧啶核心骨架，具有叔丁基取代基和 4 位氯原子，赋予其独特的空间位阻效应和反应活性。纯度 ≥96% (HPLC)，溶解性表现为易溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇，微溶于水。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为杂环芳烃衍生物，是构建复杂生物活性分子的关键中间体。其嘧啶环结构可模拟核酸碱基，参与氢键形成和分子识别，而氯原子提供了进一步官能团化的反应位点。在药物化学中，此类结构常用于激酶抑制剂、抗病毒剂的设计，尤其在抗肿瘤先导化合物优化中具有重要价值。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域：

- (1) 作为蛋白激酶抑制剂的核心骨架，用于癌症靶向治疗药物开发；
- (2) 在抗病毒药物筛选中作为结构修饰模块；
- (3) 用于有机发光材料 (OLED) 的前体合成；
- (4) 农业化学中高选择性杀虫剂的中间体。

#### 4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，避光、防潮，建议温度 -20° C 至 4° C 长期保存。开封后需充惰性气体保护。使用前需恢复至室温并干燥处理，推荐在通风橱中操作。溶解时优先选用无水 DMSO，避免与强氧化剂、强酸接触。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 和质谱严格质检，批号关联完整分析证书。安全数据：

- (1) 危害标识：H315-H319 (皮肤/眼刺激)，H335 (呼吸道刺激)；

- (2) 防护措施: 佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套;
- (3) 应急处理: 接触皮肤时立即用肥皂水冲洗, 吸入转移至空气新鲜处;
- (4) 废弃物处置: 按危险化学品规范处理。

注: 具体实验方案需结合目标反应体系优化, 建议参考文献或咨询技术支持。