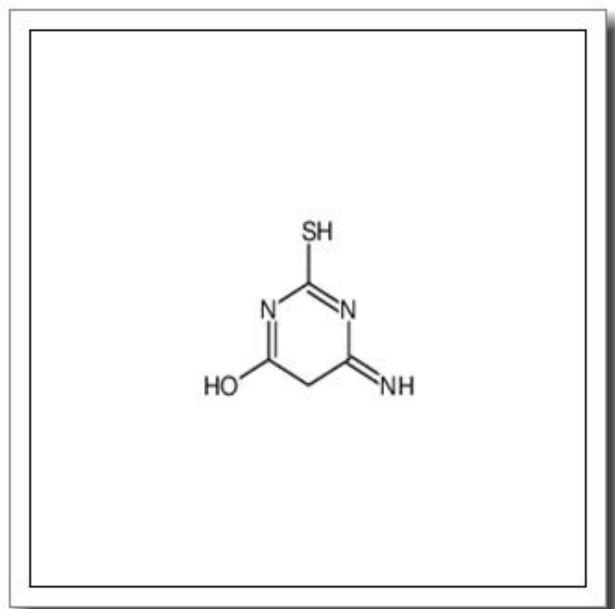


6-氨基-2,5-二氢-2-硫氧代-4(3H)-嘧啶酮

6-amino-2-sulfanylidene-5H-pyrimidin-4-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	6-amino-2-sulfanylidene-5H-pyrimidin-4-one
中文名称	6-氨基-2,5-二氢-2-硫氧代-4(3H)-嘧啶酮
CAS号	42985-76-2
分子式	C ₄ H ₅ N ₃ O ₂ S
分子量	143.167
纯度	≥96%

产品说明

6-氨基-2,5-二氢-2-硫氧代-4(3H)-嘧啶酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 6-amino-2-sulfanylidene-5H-pyrimidin-4-one, CAS 号为 42985-76-2, 是一种含硫嘧啶衍生物。其分子式为 $C_4H_5N_3OS$, 分子量为 143.167, 纯度 $\geq 96\%$ 。该化合物为白色至淡黄色结晶性粉末, 具有嘧啶环的典型化学性质, 可在特定条件下发生亲核取代和氧化反应。其结构中氨基和硫代羰基的存在使其兼具亲水性和反应活性, 适合作为有机合成中间体或生物活性分子修饰基团。

2. 生物化学功能与重要性

作为嘧啶类化合物, 该物质在核苷酸代谢途径中具有潜在调控作用。其结构类似天然嘧啶碱基, 可通过竞争性抑制影响相关酶活性。硫代羰基的引入增强了其与金属离子的配位能力, 在模拟生物酶活性中心的研究中具有特殊价值。此外, 氨基的活性使其易于与生物大分子偶联, 在药物设计和分子探针开发中具有重要意义。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于以下领域: 医药研发中作为抗病毒或抗肿瘤化合物的合成前体; 农业化学中用于制备植物生长调节剂; 材料科学中作为功能化聚合物的单体。具体用途包括: 用于构建杂环药物分子骨架, 如噻唑并嘧啶类化合物合成; 作为荧光标记物的连接臂; 在金属配合物催化体系中充当配体。

4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光条件下储存, 保持温度 $2-8^{\circ}C$ 。开封后需充惰性气体保护, 防止氧化。使用时应佩戴防护手套和护目镜, 在通风橱中操作。溶解性测试表明, 该产品易溶于二甲基亚砜 (DMSO), 微溶于热水, 难溶于多数有机溶剂。建议先用 DMSO 配制母液, 再按实验需求稀释。避免与强氧化剂接触, 防止硫基氧化。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 重金属含量 $< 10ppm$ 。急性毒性数据显示其 LD_{50} (大鼠经口) 为 $1250mg/kg$, 属于低毒类化合物。但长期接触可能引起皮肤过敏,

操作后需彻底清洗。废弃物处理应遵守当地化学品管理法规，建议采用焚烧法处置。提供符合 ISO 9001 标准的质量证书和物质安全数据表（MSDS），确保实验可追溯性和安全性。