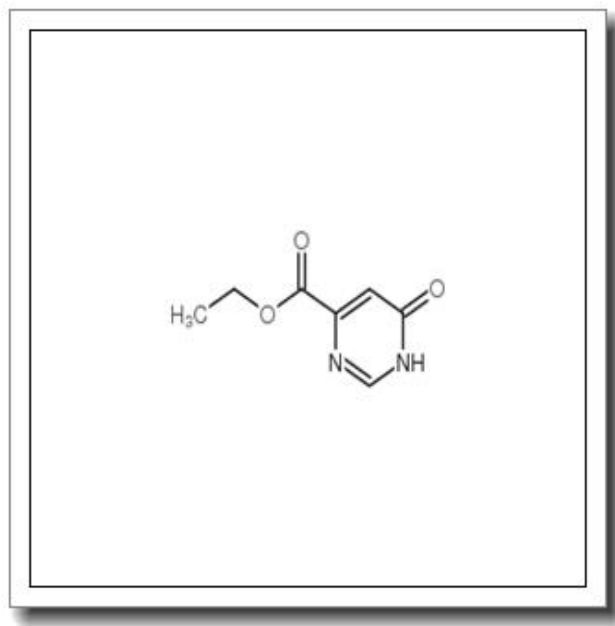


6-羰基-1,6-二氢嘧啶-4-羧酸乙酯

ethyl 4-oxo-1H-pyrimidine-6-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 4-oxo-1H-pyrimidine-6-carboxylate
中文名称	6-羰基-1,6-二氢嘧啶-4-羧酸乙酯
CAS 号	223788-14-5
分子式	C ₇ H ₈ N ₂ O ₃
分子量	168.15
纯度	≥96%

产品说明

6-羰基-1,6-二氢嘧啶-4-羧酸乙酯 (ethyl 4-oxo-1H-pyrimidine-6-carboxylate, CAS 号 223788-14-5) 是一种重要的嘧啶类衍生物, 分子式为 $C_7H_8N_2O_3$, 分子量 168.15。本品为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有良好的化学稳定性和溶解性, 可溶于常见有机溶剂如乙醇、二甲基亚砷等。其结构中的嘧啶环和酯基赋予其独特的反应活性, 是医药中间体和功能材料合成的关键砌块。

在生物化学领域, 该化合物作为嘧啶核苷酸类似物的前体, 可参与核酸代谢途径的调控。其羰基和酯基官能团使其易于进行亲核取代、缩合等反应, 为修饰生物活性分子提供灵活位点。此外, 其结构特征对开发抗病毒、抗肿瘤药物具有潜在价值, 尤其在核苷类药物的结构优化中作用显著。

该产品主要应用于三个领域: 1. 医药研发中作为抗病毒药物 (如 HIV 抑制剂) 和抗肿瘤药物的中间体; 2. 材料科学中用于合成荧光标记物或光电材料前体; 3. 学术研究作为酶抑制剂或受体配体的结构模块。具体实验中常用于构建杂环化合物库或通过酯水解制备相应羧酸衍生物。

储存条件建议在 -20°C 避光干燥环境下密封保存, 长期储存需充惰性气体保护。使用前需恢复至室温并避免吸湿, 建议在通风橱中操作。溶解时优先选用无水溶剂, 水溶液需现配现用以防止酯基水解。

质量控制通过 HPLC、NMR 和质谱进行批次验证, 确保纯度 $\geq 96\%$ 。安全信息显示该物质可能引起眼睛和皮肤刺激, 操作时应佩戴防护装备。如接触皮肤需立即用大量清水冲洗, 吸入暴露需转移至空气新鲜处。废弃物处置需符合危险化学品管理规范, 避免与强氧化剂接触。详细安全数据可参考 MSDS 第 14 节生态毒理学信息。