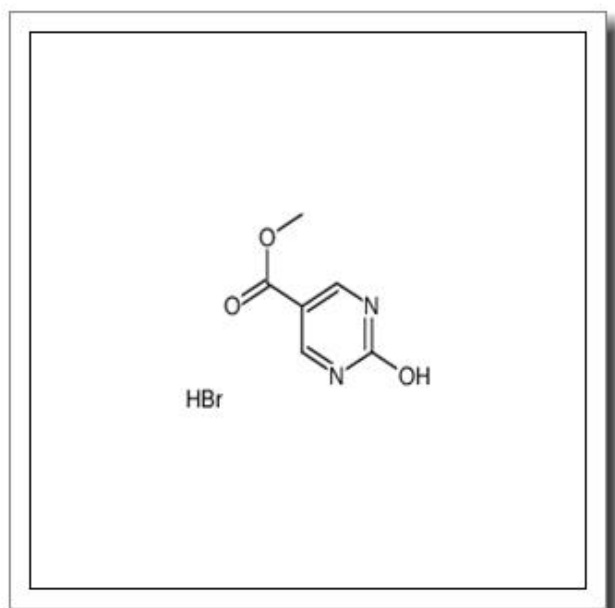


methyl 2-oxo-1H-pyrimidine-5-carboxylate,hydrobromide

methyl 2-oxo-1H-pyrimidine-5-carboxylate, hydrobromide



产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 2-oxo-1H-pyrimidine-5-carboxylate, hydrobromide
中文名称	methyl 2-oxo-1H-pyrimidine-5-carboxylate, hydrobromide
CAS 号	50628-31-4
分子式	C6H7BrN2O3
分子量	235.035
纯度	≥ 96%

产品说明

甲基-2-氧代-1H-嘧啶-5-羧酸酯氢溴酸盐产品说明

1. 产品概述与化学特性

甲基-2-氧代-1H-嘧啶-5-羧酸酯氢溴酸盐（CAS 号：50628-31-4）是一种嘧啶类衍生物，分子式为 $C_6H_7BrN_2O_3$ ，分子量为 235.035。本品为白色至类白色结晶性粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，易溶于极性有机溶剂（如甲醇、二甲基亚砜），微溶于水。其结构中的嘧啶环和酯基使其兼具亲水性与亲脂性，适合作为有机合成中间体或生物活性分子修饰的前体。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是嘧啶酮类结构的重要代表，嘧啶环作为核酸碱基的核心骨架，在核苷酸代谢、酶抑制及药物设计中具有关键作用。其 2-位羰基和 5-位酯基可参与亲核取代、缩合等反应，常用于构建具有生物活性的杂环化合物，如抗病毒、抗肿瘤药物的先导结构。

3. 主要应用领域与具体用途

- 医药研发：作为合成抗代谢类药物的中间体，用于开发抗肿瘤或抗感染化合物。
- 农药化学：修饰后可作为杀菌剂或植物生长调节剂的活性组分。
- 学术研究：用于嘧啶类衍生物的构效关系研究及酶抑制剂筛选。

4. 储存条件与使用建议

- 储存：密封避光，置于干燥、阴凉处（2-8℃），避免与强氧化剂、酸碱接触。
- 使用：建议在惰性气体保护下操作，溶解时选用无水溶剂以减少水解风险。实验人员需佩戴防护手套及护目镜。

5. 质量控制与安全信息

- 质量控制：通过 HPLC 检测纯度，核磁共振（NMR）和质谱（MS）验证结构。
- 安全信息：本品对眼睛、皮肤有刺激性，操作时应在通风橱中进行。若接触，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。

本产品仅供科研用途，不适用于食品、药品或家庭使用。