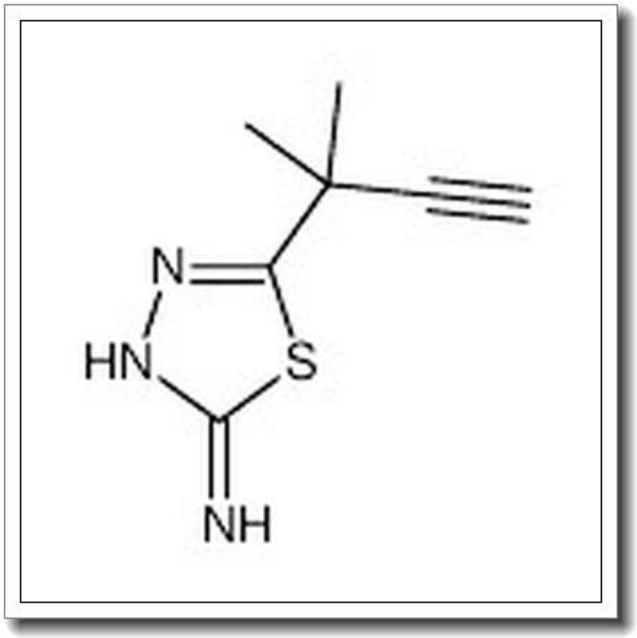
5-(2-Methyl-3-butyn-2-yl)-1,3,4-thiadiazol-2-amine

5-(2-Methyl-3-butyn-2-yl)-1,3,4-thiadiazol-2-amine



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-(2-Methyl-3-butyn-2-yl)-1,3,4-thiadiazol-2-amine
中文名称	5-(2-Methyl-3-butyn-2-yl)-1,3,4-thiadiazol-2-amine
CAS 号	97987-64-9
分子式	C7H9N3S
分子量	167.231
纯度	>96%

产品说明

5-(2-Methyl-3-butyn-2-yl)-1,3,4-thiadiazol-2-amine 产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶粉末，化学名称为 5-(2-甲基-3-丁炔-2-基)-1,3,4-噻二唑-2-胺，CAS 号 97987-64-9，分子式 C7H9N3S，分子量 167.231。其结构中同时含有噻二唑环和炔基官能团，赋予其独特的化学活性。纯度经 HPLC 验证≥96%，符合生化试剂标准。该化合物在常温下稳定，可溶于常见有机溶剂如 DMSO 和甲醇，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为噻二唑类衍生物，该化合物表现出显著的生物活性，尤其是其噻二唑环可作为氢键受体与供体，与生物大分子产生特异性相互作用。炔基结构则为其提供了点击化学修饰的潜力，使其成为药物开发中重要的中间体。研究表明，类似结构的噻二唑胺类化合物具有抗菌、抗肿瘤等药理活性。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于医药研发和有机合成领域。在药物化学中，常用于构建先导化合物的核心骨架，特别是针对激酶抑制剂的开发。在材料科学中，可作为功能分子用于制备光电材料。此外，其炔基特性使其成为生物共轭反应的理想选择，适用于蛋白质标记和探针合成。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于-20℃干燥环境中，避免光照和潮湿。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时应在通风橱中操作，佩戴防护手套和护目镜。溶解时优先选用 DMSO（浓度≤10mM），水溶液需现配现用。长期储存建议定期检测纯度。

5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱（MS）和核磁共振（NMR）验证结构，批次间一致性控制在±2%以内。安全数据表明，该物质可能引起眼睛和皮肤刺激，操作时应避免直接接触。如

发生泄漏，需用惰性吸附材料处理。废弃物应按照危险化学品规范处置。详细毒理学数据可参考随附的 MSDS 报告。