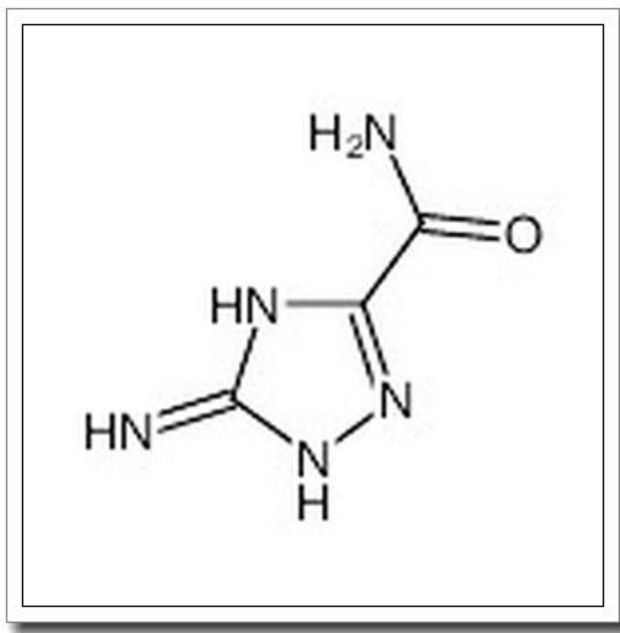


5-氨基-1H-1,2,4-噁唑-3-羧酰胺

3-Amino-1H-1,2,4-triazole-5-carboxamide



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-Amino-1H-1,2,4-triazole-5-carboxamide
中文名称	5-氨基-1H-1,2,4-噁唑-3-羧酰胺
CAS 号	60016-63-9
分子式	C ₃ H ₅ N ₅ O
分子量	127.105
纯度	>96%

产品说明

3-氨基-1H-1,2,4-三唑-5-甲酰胺产品说明书

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 3-氨基-1H-1,2,4-三唑-5-甲酰胺 (3-Amino-1H-1,2,4-triazole-5-carboxamide)，CAS 号 60016-63-9，分子式 $C_3H_5N_5O$ ，分子量 127.105。其结构中同时含有氨基和甲酰胺基团，赋予其独特的酸碱两性特性，可溶于极性有机溶剂（如 DMSO、甲醇），微溶于水。纯度经 HPLC 验证 $\geq 96\%$ ，符合生化试剂标准。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为三唑类衍生物的核心骨架，具有显著的杂环生物活性。其分子中的氨基和甲酰胺基可作为氢键供体/受体，参与酶活性位点相互作用，在药物化学中常用于构建激酶抑制剂或核苷类似物。此外，其刚性三唑环结构能增强代谢稳定性，在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

在医药研发领域，本品是合成抗肿瘤药物（如 PARP 抑制剂）和抗病毒剂的关键中间体。农业化学中可用于制备植物生长调节剂。在基础研究中，常作为金属配体用于催化反应，或修饰生物分子以研究蛋白质-小分子相互作用。具体应用需结合实验体系优化反应条件。

4. 储存条件与使用建议

建议密闭保存于 -20°C 干燥环境中，避免光照及湿度影响。开封后需充惰性气体保护，长期储存建议分装。使用时佩戴防护手套，在通风橱中操作。溶解推荐使用预冷的 DMSO（浓度 $\leq 10\text{mM}$ ），水溶液需现配现用。与强氧化剂、强酸/碱接触可能发生剧烈反应，需单独存放。

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，批次间一致性误差 $< 2\%$ 。急性毒性数据 (LD50 大鼠口服) 为 1250mg/kg ，属于低毒类物质，但吸入粉尘可能刺激

呼吸道。废弃物处理需符合当地化学品管理条例，建议通过专业机构焚烧降解。安全数据表（SDS）可随货提供或官网下载。

注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用请结合最新文献验证。