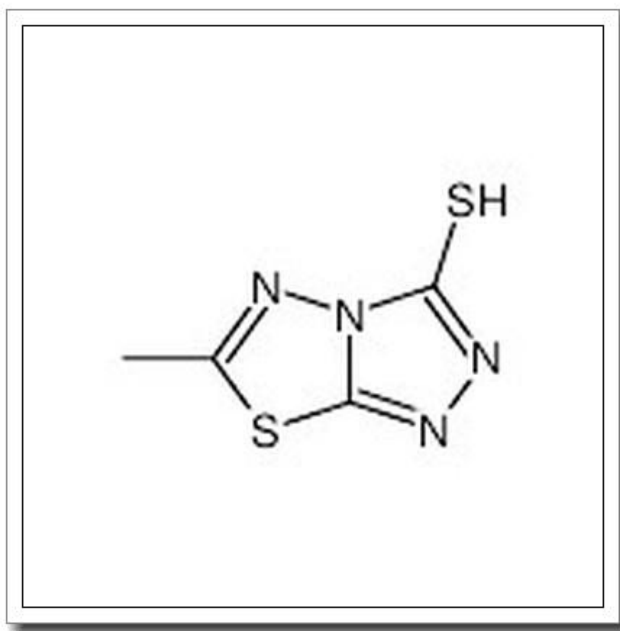


# 6-methyl-2H-[1,2,4]triazolo[3,4-b][1,3,4]thiadiazole-3-thione

*6-methyl-2H-[1,2,4]triazolo[3,4-b][1,3,4]thiadiazole-3-thione*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	6-methyl-2H-[1,2,4]triazolo[3,4-b][1,3,4]thiadiazole-3-thione
中文名称	6-methyl-2H-[1,2,4]triazolo[3,4-b][1,3,4]thiadiazole-3-thione
CAS 号	14778-87-1
分子式	C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub> S <sub>2</sub>
分子量	172.231
纯度	>96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

6-methyl-2H-[1,2,4]triazolo[3,4-b][1,3,4]thiadiazole-3-thione (CAS 号 14778-87-1) 是一种含氮硫杂环化合物, 分子式为  $C_4H_4N_4S_2$ , 分子量为 172.231。该化合物由三唑并噻二唑骨架构成, 具有独特的电子结构和反应活性。其纯度高于 96%, 外观通常为白色至淡黄色结晶粉末, 可溶于部分有机溶剂 (如 DMSO、DMF), 但在水中溶解度较低。结构中硫酮基团 ( $-C=S$ ) 和杂环氮原子赋予其配位能力和生物活性。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其杂环结构表现出显著的生物活性, 可作为酶抑制剂或金属离子螯合剂。其三唑环与噻二唑环的共轭体系可能干扰生物体内电子传递过程, 在抗微生物、抗肿瘤或抗氧化研究中具有潜在价值。此外, 硫酮基团易与金属离子 (如  $Cu^{2+}$ 、 $Fe^{3+}$ ) 结合, 适用于金属酶模拟或催化研究。

### 3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发中, 该分子可作为先导化合物用于设计新型抗菌或抗炎药物; 在材料科学中, 其杂环结构可用于合成导电聚合物或荧光探针; 农业化学领域则探索其作为植物生长调节剂或杀虫剂的潜力。实验室中常用于有机合成中间体或配体化学研究。

### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于  $-20^{\circ}C$  至  $4^{\circ}C$  的干燥环境中, 避免光照和潮湿。开封后需充惰性气体 (如氮气) 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。溶解推荐使用无水 DMSO, 配制溶液需现配现用, 长期储存可能导致降解。

### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 验证纯度  $\geq 96\%$ , 批次间提供 COA 分析报告。其急性毒性数据有限, 操作时需遵循 GHS 标准: 可能引起皮肤刺激 (H315) 和眼睛损伤 (H318), 不

慎接触需用大量清水冲洗并就医。废弃物应作为有害化学品处理，禁止直接排放。  
运输分类为 UN2811（6.1 类），需符合危险品运输法规。