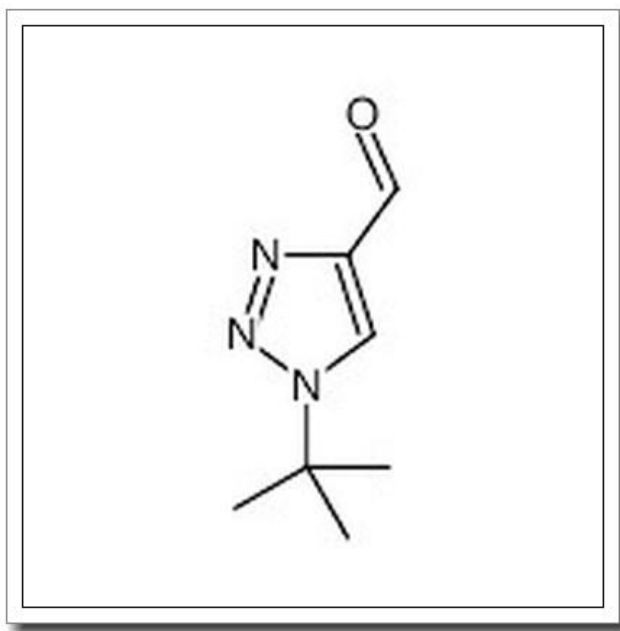


(9ci)-1-(1,1-二甲基乙基)-1H-1,2,3-噁唑-4-羧醛

1-tert-butyltriazole-4-carbaldehyde



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-tert-butyltriazole-4-carbaldehyde
中文名称	(9ci)-1-(1,1-二甲基乙基)-1H-1,2,3-噁唑-4-羧醛
CAS 号	129027-65-2
分子式	C ₇ H ₁₁ N ₃ O
分子量	153.182
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-tert-butyltriazole-4-carbaldehyde (CAS 号: 129027-65-2) 是一种有机化合物, 化学名称为(9ci)-1-(1,1-二甲基乙基)-1H-1,2,3-噁唑-4-羧醛。其分子式为 $C_7H_{11}N_3O$, 分子量为 153.182, 纯度通常高于 96%。该化合物属于三唑类衍生物, 结构中包含一个叔丁基和一个醛基, 具有较高的反应活性。其外观通常为白色至淡黄色结晶或粉末, 易溶于有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

1-tert-butyltriazole-4-carbaldehyde 作为一种重要的中间体, 在有机合成和药物化学中具有广泛的应用。其醛基可以与胺类化合物发生缩合反应, 生成希夫碱或其他衍生物, 常用于构建杂环化合物或作为配体参与金属催化反应。此外, 三唑环结构在药物设计中具有重要作用, 因其能够增强分子的稳定性和生物活性。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于医药研发和材料科学领域。在医药领域, 它可作为合成抗病毒、抗肿瘤或抗菌药物的关键中间体。在材料科学中, 它可用于制备功能性高分子材料或作为配体用于催化剂的开发。此外, 它还可能在农药和染料工业中作为合成前体使用。

4. 储存条件与使用建议

为确保产品的稳定性和安全性, 建议将 1-tert-butyltriazole-4-carbaldehyde 储存于干燥、阴凉的环境中, 避免阳光直射和潮湿。理想的储存温度为 2-8°C, 长期保存时应置于惰性气体 (如氮气) 保护下。使用时需在通风良好的环境中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。建议佩戴防护手套、护目镜和实验室外套。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过高效液相色谱 (HPLC) 和核磁共振 (NMR) 进行质量控制, 确保纯度高于 96%。安全信息方面, 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性, 操作时应

严格遵守实验室安全规范。如不慎接触，应立即用大量清水冲洗，并寻求医疗帮助。废弃物应按照当地法规进行处置，避免对环境造成污染。