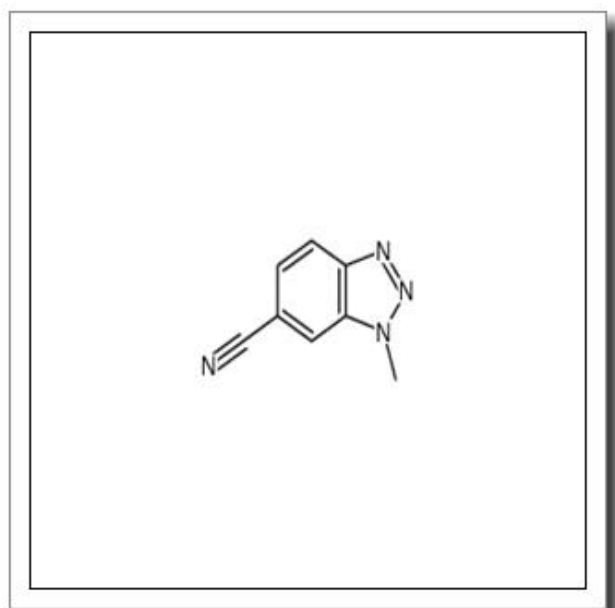


1-methyl-1H-1,2,3-benzotriazole-6-carbonitrile

1-methyl-1H-1,2,3-benzotriazole-6-carbonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-methyl-1H-1,2,3-benzotriazole-6-carbonitrile
中文名称	1-methyl-1H-1,2,3-benzotriazole-6-carbonitrile
CAS 号	864274-02-2
分子式	C ₈ H ₆ N ₄
分子量	158.16
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-甲基-1H-1,2,3-苯并三唑-6-甲腈 (CAS 号: 864274-02-2) 是一种含氮杂环化合物, 分子式为 $C_8H_6N_4$, 分子量为 158.16。该化合物以苯并三唑为母核, 在 1 位引入甲基、6 位引入氰基, 形成具有独特电子效应的结构。其纯度 $\geq 96\%$, 常温下为白色至类白色固体, 可溶于常见有机溶剂 (如 DMSO、甲醇), 但在水中溶解度较低。其结构中的三唑环和氰基赋予其良好的稳定性和反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯并三唑类衍生物, 该化合物在生物化学领域具有多重功能。其三唑环可作为金属离子配体, 参与酶抑制或催化反应; 氰基则可能作为活性位点, 用于进一步衍生化或与生物大分子相互作用。此类结构常见于药物中间体或功能材料前体, 在抗肿瘤、抗病毒等药物研发中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于以下领域:

- 医药研发: 作为小分子抑制剂或药物中间体, 用于构建靶向抗肿瘤化合物的核心骨架。
- 材料科学: 用于合成荧光探针或光电材料的功能性单体。
- 化学合成: 作为配体或催化剂组分, 参与过渡金属催化反应。
- 农业化学: 可能用于开发新型农药活性成分。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光密封保存, 长期储存需充惰性气体保护。使用时需在干燥环境下操作, 避免接触强氧化剂或强酸。溶解推荐使用无水 DMSO, 配制溶液后建议短期内使用完毕。实验人员需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 批次间质量稳定。安全信息如下:

- 潜在危害: 可能对眼睛、皮肤有刺激性, 吸入粉尘可能导致呼吸道不适。

- 应急处理：接触皮肤时立即用大量清水冲洗，误食需就医。
- 废弃物处置：按危险化学品规范处理，不可直接排入环境。

（注：以上说明基于现有数据，实际应用前请查阅最新文献或进行小试验证。）