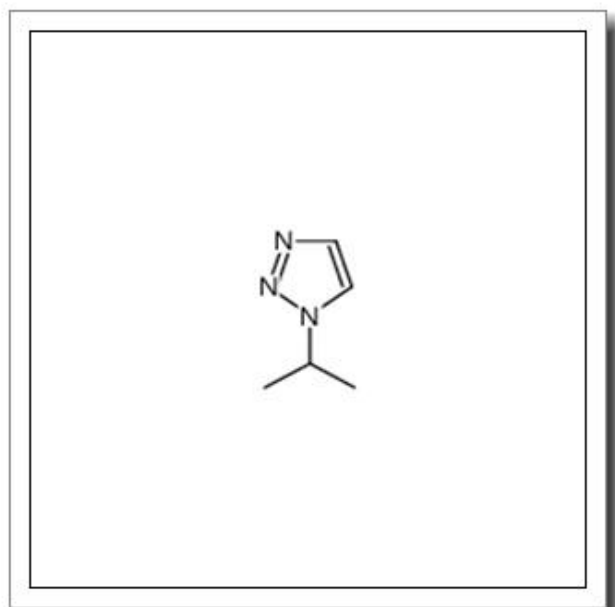


1-propan-2-yltriazole

1-propan-2-yltriazole



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-propan-2-yltriazole
中文名称	1-propan-2-yltriazole
CAS 号	499132-20-6
分子式	C ₅ H ₉ N ₃
分子量	111.145
纯度	≥96%

产品说明

1-丙-2-基三唑产品说明书

1. 产品概述与化学特性

1-丙-2-基三唑 (1-propan-2-yltriazole, CAS 号 499132-20-6) 是一种含氮杂环化合物, 分子式为 $C_5H_9N_3$, 分子量 111.145。本品为白色至类白色结晶或粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有三唑环特有的稳定性与反应活性, 可溶于常见有机溶剂如乙醇、丙酮和乙醚, 微溶于水。其结构中的三唑基团和丙基侧链赋予其独特的配位能力和空间位阻效应, 适用于催化、配位化学及药物合成等领域。

2. 生物化学功能与重要性

作为三唑类衍生物, 1-丙-2-基三唑可通过氮原子参与氢键形成和金属配位, 在生物体系中表现出潜在的酶抑制或受体结合活性。其结构类似天然嘌呤碱基, 可能干扰核酸代谢, 因此在抗病毒、抗菌药物研发中具有探索价值。此外, 该化合物可作为有机合成中间体, 用于构建更复杂的杂环体系或功能化分子。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药领域, 本品用于合成抗真菌剂和抗肿瘤先导化合物; 在材料科学中, 可作为配体修饰金属有机框架 (MOFs) 或催化剂的组分。农业化学中, 其衍生物可能用于植物生长调节剂或杀虫剂开发。实验室中常用于杂环化合物库构建及结构-活性关系 (SAR) 研究。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 避光、防潮, 温度控制在 $2-8^{\circ}C$ (长期保存) 或室温 (短期使用)。操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩, 确保通风良好。避免与强氧化剂、强酸接触。溶解建议使用干燥有机溶剂, 现配现用以保证反应效率。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 批次间稳定性高。安全数据表明, 其急性毒性 (LD50) 需参考具体实验数据, 但应视为有害物质, 避免吸入或皮肤直接接触。废

弃物处置需符合当地化学品管理法规。如发生泄漏，用惰性吸附材料收集后交由专业机构处理。

注：具体实验方案请结合文献方法优化，使用前务必查阅最新版 MSDS 获取详细安全信息。