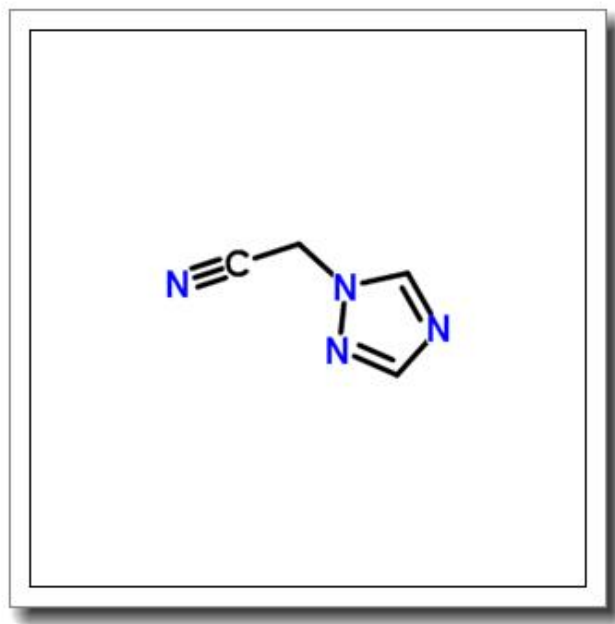


1H-1,2,4-三唑-1-乙腈

2-(1H-1,2,4-Triazol-1-yl)acetonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(1H-1,2,4-Triazol-1-yl)acetonitrile
中文名称	1H-1,2,4-三唑-1-乙腈
CAS 号	81606-79-3
分子式	C ₄ H ₄ N ₄
分子量	108.101
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1H-1, 2, 4-三唑-1-乙腈 (化学名称: 2-(1H-1, 2, 4-Triazol-1-yl)acetonitrile) 是一种含氮杂环化合物, CAS 号为 81606-79-3, 分子式为 C₄H₄N₄, 分子量为 108.101。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 纯度通常不低于 96%。其结构中的三唑环和乙腈基团赋予其独特的化学性质, 包括良好的稳定性和反应活性, 适合作为有机合成中间体或生物活性分子的构建模块。

2. 生物化学功能与重要性

1H-1, 2, 4-三唑-1-乙腈在生物化学领域具有重要价值。三唑类化合物因其广泛的生物活性 (如抗菌、抗真菌和抗肿瘤作用) 而备受关注。该化合物可作为合成三唑类药物的关键中间体, 用于开发新型药物或农用化学品。此外, 其乙腈基团可通过进一步反应引入其他功能团, 扩展其在药物设计和材料科学中的应用潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药、农药和材料科学领域。在医药研发中, 它是合成三唑类抗真菌药物 (如氟康唑) 的重要前体。在农药领域, 可用于制备高效低毒的杀菌剂或植物生长调节剂。此外, 在有机合成中, 它可作为配体或催化剂组分, 参与偶联反应或环化反应。

4. 储存条件与使用建议

建议将产品密封保存于干燥、阴凉的环境中, 避免光照和潮湿, 储存温度以 2-8°C 为宜。使用时需在通风良好的条件下操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明, 该化合物易溶于极性有机溶剂 (如 DMF、DMSO), 使用时可根据实验需求选择合适的溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度 ≥96%, 并提供详细的质量分析报告 (COA)。安全方面, 该化合物对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性, 操作时应佩戴防护手套、护目镜和

防尘口罩。若不慎接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照当地法规处理，避免环境污染。