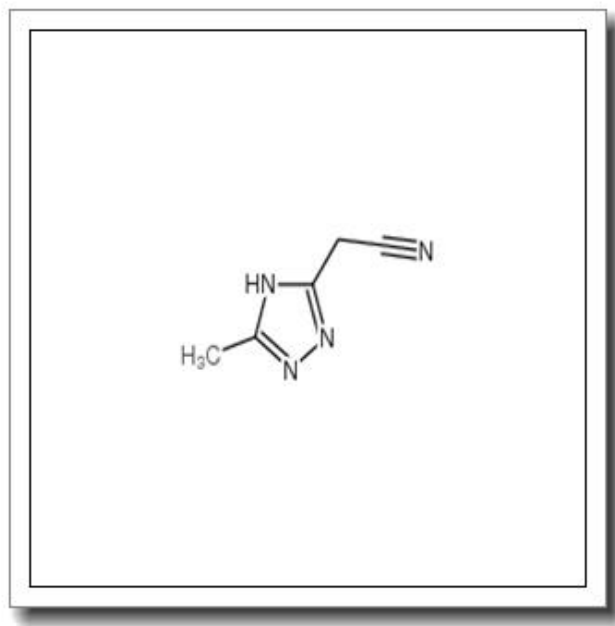


# 2-(5-甲基-4H-1,2,4-噻唑-3-基)乙腈

*2-(5-methyl-1H-1,2,4-triazol-3-yl)acetonitrile*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(5-methyl-1H-1,2,4-triazol-3-yl)acetonitrile
中文名称	2-(5-甲基-4H-1,2,4-噻唑-3-基)乙腈
CAS 号	86999-26-0
分子式	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub>
分子量	122.128
纯度	≥96%

## 产品说明

### 2-(5-甲基-4H-1,2,4-噻唑-3-基)乙腈产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 2-(5-methyl-1H-1,2,4-triazol-3-yl)acetonitrile，是一种含氮杂环化合物，CAS 号为 86999-26-0，分子式 C<sub>5</sub>H<sub>6</sub>N<sub>4</sub>，分子量 122.128。其结构包含 1,2,4-三唑环与乙腈基团，常温下为白色至类白色结晶粉末，纯度 ≥96%。该化合物具有较高的极性，可溶于甲醇、乙醇等有机溶剂，微溶于水，需避光保存以避免光解反应。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为三唑类衍生物，该分子可通过杂环氮原子参与配位或氢键形成，在药物化学中常作为关键中间体。其氰基和三唑环结构赋予其潜在的生物活性，例如作为酶抑制剂或受体拮抗剂的构建模块。在核苷类似物合成中，此类结构可模拟天然碱基，干扰核酸代谢过程。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发和有机合成领域。具体用途包括：抗病毒药物（如 HIV 蛋白酶抑制剂）的前体合成、抗癌药物中杂环骨架的构建、农用化学品（如杀菌剂）的活性组分修饰。此外，在材料科学中可用于制备含氮配体，配合金属催化剂使用。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议密封储存于 2-8℃ 干燥环境中，避免与强氧化剂、强酸强碱接触。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。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 DMF 或 THF，若需水相反应建议预先进行溶剂筛选实验。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%，重金属含量 <10ppm，符合医药级标准。安全数据表明其 LD<sub>50</sub>（大鼠经口）为 650mg/kg，属于有害物质，可能引起皮肤刺激和眼部损

伤。废弃物处理需遵循当地化学品管理条例，不可直接排入下水道。实验过程中如发生泄漏，需用惰性吸附材料收集并交由专业机构处置。

注：以上信息基于现有研究数据，实际应用前请查阅最新文献并开展小试实验验证。