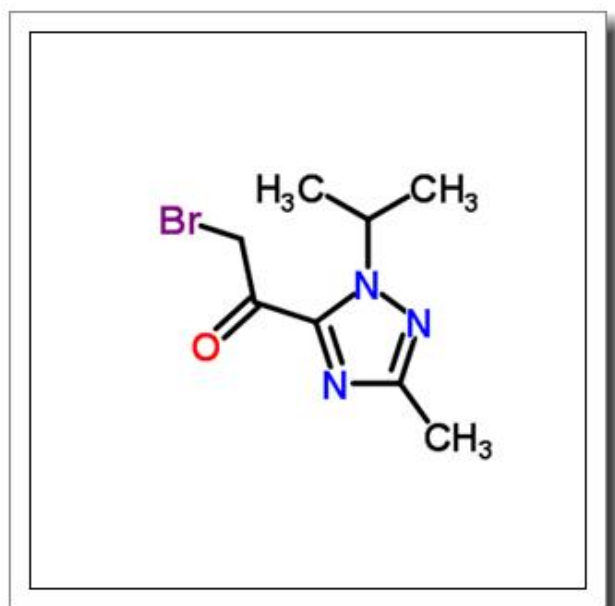


2-Bromo-1-(1-isopropyl-3-methyl-1H-1,2,4-triazol-5-yl)ethanone

2-Bromo-1-(1-isopropyl-3-methyl-1H-1,2,4-triazol-5-yl)ethanone



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Bromo-1-(1-isopropyl-3-methyl-1H-1,2,4-triazol-5-yl)ethanone
中文名称	2-Bromo-1-(1-isopropyl-3-methyl-1H-1,2,4-triazol-5-yl)ethanone
CAS 号	1282517-46-7
分子式	C ₈ H ₁₂ BrN ₃ O
分子量	246.104
纯度	≥ 96%

产品说明

2-溴-1-(1-异丙基-3-甲基-1H-1,2,4-三唑-5-基)乙酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶粉末，化学名称为 2-溴-1-(1-异丙基-3-甲基-1H-1,2,4-三唑-5-基)乙酮，CAS 号 1282517-46-7，分子式 C₈H₁₂BrN₃O，分子量 246.104。其结构中含溴代酮基团与 1,2,4-三唑杂环，赋予其高反应活性。纯度 ≥96% (HPLC 测定)，易溶于有机溶剂如二氯甲烷、乙腈，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为重要的有机合成中间体，其 1,2,4-三唑环可参与氢键形成和金属配位，溴代酮基团则易发生亲核取代反应。在药物化学中，此类结构常用于构建抗菌、抗真菌活性分子的核心骨架，尤其在唑类衍生物开发中具有关键作用。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药和农药研发领域。在医药方向，用于合成新型三唑类抗感染药物先导化合物；在农药领域，可作为杀菌剂和植物生长调节剂的中间体。实验室中常用于杂环化合物的结构修饰及活性分子库构建。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20℃ 至 4℃ 干燥环境中，避免光照和湿度。开封后需充惰性气体保护。使用时应在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解建议采用无水 DMF 或 THF，反应温度不宜超过 60℃ 以防分解。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 和质谱严格质检，符合标准品规格。安全数据表明其具有刺激性，操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。如接触皮肤，立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物应按危险化学品规范处置，避免环境污染。

(注：本说明基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件验证。)