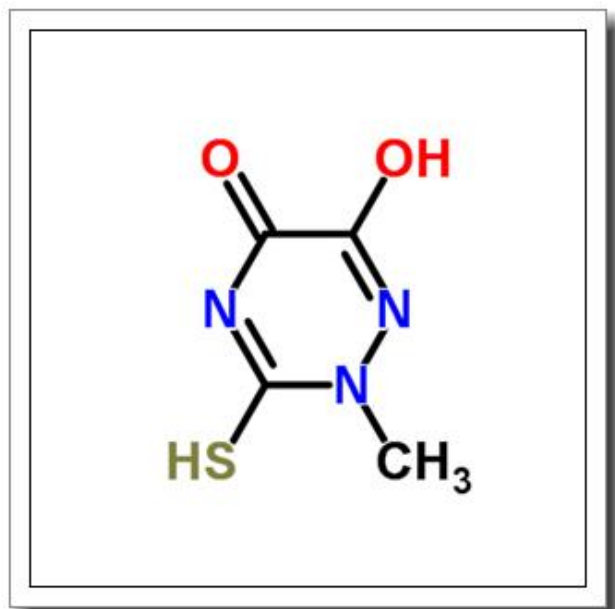


# 2,5-二氢-6-羟基-2-甲基-5-氧-3-巯基-1,2,4-三嗪

*Tetrahydro-2-Methyl-3-Thioxo-1,2,4-Triazine-5,6-Dione*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	Tetrahydro-2-Methyl-3-Thioxo-1,2,4-Triazine-5,6-Dione
中文名称	2,5-二氢-6-羟基-2-甲基-5-氧-3-巯基-1,2,4-三嗪
CAS 号	58909-39-0
分子式	C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub> S
分子量	159.166
纯度	≥96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

Tetrahydro-2-Methyl-3-Thioxo-1,2,4-Triazine-5,6-Dione (化学名称) 是一种高纯度有机硫化合物, 中文名称为 2,5-二氢-6-羟基-2-甲基-5-氧-3-巯基-1,2,4-三嗪, CAS 号为 58909-39-0。其分子式为  $C_4H_5N_3O_2S$ , 分子量为 159.166, 纯度不低于 96%。该化合物为白色至淡黄色结晶粉末, 具有独特的硫代三嗪结构, 易溶于极性有机溶剂 (如 DMSO、甲醇), 但在水中溶解度较低。其化学结构中含有的巯基 (-SH) 和羰基 (-C=O) 赋予其较高的反应活性, 尤其在亲核取代和金属配位反应中表现显著。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其三嗪环与巯基的协同作用, 在生物化学领域具有多重功能。巯基可作为还原剂或金属离子螯合剂, 参与氧化还原反应; 三嗪环则能模拟天然嘧啶碱基的结构, 干扰核酸代谢。研究表明, 其衍生物可能具有抗菌、抗肿瘤或酶抑制活性, 尤其在针对含巯基酶 (如半胱氨酸蛋白酶) 的抑制作用中显示出潜在应用价值。

### 3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发中, 本品常用于构建三嗪类药物的核心骨架, 用于开发抗感染或抗代谢类药物。在材料科学领域, 其巯基可作为交联剂参与高分子材料的合成。此外, 它还可用作有机合成中间体, 用于制备荧光标记物或功能性配体。具体实验用途包括: 体外酶活性抑制研究、金属离子探针合成, 以及作为光敏材料的改性添加剂。

### 4. 储存条件与使用建议

建议在  $-20^{\circ}C$ 、避光、干燥条件下密封保存, 长期储存需充入惰性气体 (如氮气) 以延缓氧化。使用时需在惰性气氛 (如氩气手套箱) 中操作, 避免与强氧化剂或重金属盐直接接触。溶解推荐使用预脱气的 DMSO, 配制后溶液建议现配现用。实验人员应佩戴防护手套、护目镜, 并在通风橱中处理粉末状产品。

### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ , 残留溶剂符合 USP 标准。MSDS 标明其为刺激性

物质，接触皮肤或眼睛可能引起炎症，应急处理需用大量清水冲洗并就医。废弃物应作为有害化学废物处置，禁止直接排入下水道。运输时需贴附“有害化学品”标签，UN 编号需根据具体法规确定。

（注：实际使用前请查阅最新版技术手册，以上信息基于现有研究数据，可能随科学进展调整。）