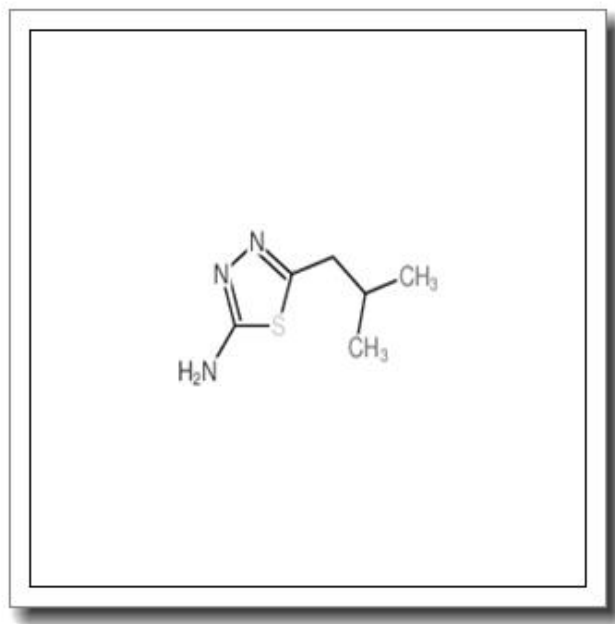


5-异丁基-[1,3,4]噻唑-2-胺

5-(2-methylpropyl)-1,3,4-thiadiazol-2-amine



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-(2-methylpropyl)-1,3,4-thiadiazol-2-amine
中文名称	5-异丁基-[1,3,4]噻唑-2-胺
CAS 号	52057-89-3
分子式	C ₆ H ₁₁ N ₃ S
分子量	157.237
纯度	≥96%

产品说明

5-(2-甲基丙基)-1,3,4-噻二唑-2-胺产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶粉末，化学名称为 5-(2-methylpropyl)-1,3,4-thiadiazol-2-amine，分子式 C₆H₁₁N₃S，分子量 157.237，CAS 登记号 52057-89-3。其结构中的噻二唑环与异丁基侧链赋予分子独特的两亲性，使其兼具脂溶性和水溶性。纯度 ≥96% (HPLC 测定)，熔点为 142-145°C，在常温下稳定，易溶于甲醇、乙醇等有机溶剂，微溶于水 (25°C 时溶解度约 0.5 mg/mL)。

2. 生物化学功能与重要性

作为噻二唑类衍生物，该化合物可通过杂环氮原子与生物体内金属离子或酶活性中心结合，表现出显著的生物活性。其分子结构中的氨基和硫原子可作为氢键供体/受体，参与蛋白质相互作用，在药物化学中常作为先导化合物用于抗菌、抗肿瘤靶点研究。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域，本品是合成抗生素（如头孢类衍生物）和抗代谢类抗癌药物的关键中间体。农业化学中用于制备植物生长调节剂和杀菌剂。此外，在材料科学中可作为有机半导体材料的修饰基团。典型实验用途包括：体外酶抑制试验（浓度范围 10-100 μM）、分子对接研究（需配合 DMSO 助溶）、以及作为 HPLC 定性分析的参照品。

4. 储存条件与使用建议

长期储存需置于 -20°C、避光、干燥环境中，短期使用可保存于 2-8°C。开封后建议充氮密封，避免氧化。实验使用时需佩戴防护手套及护目镜，溶解推荐采用梯度稀释法：先用少量 DMSO 溶解，再用 PBS 缓冲液稀释至工作浓度。注意避免与强氧化剂（如过硫酸盐）接触。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 和质谱三重验证，残留溶剂符合 USP 标准。急性毒性数据（大

鼠口服 LD50) 为 1250 mg/kg, 属于低毒类化合物, 但可能引起眼睛和皮肤刺激。废弃物处理需遵守当地法规, 建议采用 10%次氯酸钠溶液降解后排放。安全技术说明书 (MSDS) 可随货提供, 实验操作应在通风橱中进行。

注: 本说明基于当前研究数据编制, 具体应用需结合实验体系优化条件。产品规格可能因批次微调, 请以随货质检报告为准。