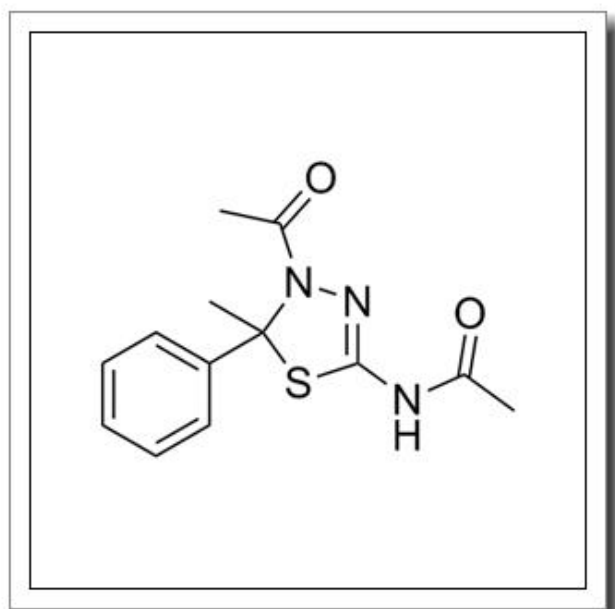


N-(4-乙酰基-4,5-二氢-5-甲基-5-苯基-1,3,4-噻二唑-2-基)乙酰胺

N-(4-Acetyl-5-methyl-5-phenyl-4,5-dihydro-1,3,4-thiadiazol-2-yl)acetamide



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|------|---|
| 化学名称 | N-(4-Acetyl-5-methyl-5-phenyl-4,5-dihydro-1,3,4-thiadiazol-2-yl)acetamide |
| 中文名称 | N-(4-乙酰基-4,5-二氢-5-甲基-5-苯基-1,3,4-噻二唑-2-基)乙酰胺 |
| CAS号 | 72926-24-0 |
| 分子式 | C ₁₃ H ₁₅ N ₃ O ₂ S |
| 分子量 | 277.342 |
| 纯度 | ≥96% |

产品说明

1. 产品概述与化学特性

N-(4-乙酰基-5-甲基-5-苯基-4,5-二氢-1,3,4-噻二唑-2-基)乙酰胺 (CAS 号: 72926-24-0) 是一种含硫氮杂环化合物, 分子式为 $C_{13}H_{15}N_3O_2S$, 分子量为 277.342。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在, 纯度 $\geq 96\%$, 具有独特的噻二唑骨架结构, 乙酰基和苯基的引入赋予其显著的化学稳定性和生物活性。其结构中包含的 1,3,4-噻二唑环是药物化学中常见的药效团, 常用于设计具有抗菌、抗炎或抗肿瘤活性的分子。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为杂环衍生物, 可通过干扰微生物或癌细胞的代谢途径发挥生物活性。其噻二唑核心能与生物体内的酶或受体相互作用, 可能抑制核酸合成或蛋白质功能。在药物研发中, 此类结构常被用作先导化合物, 通过结构修饰优化其药理特性。此外, 其乙酰氨基侧链可能增强化合物的脂溶性, 改善细胞膜穿透能力, 从而提高生物利用度。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药中间体合成, 尤其适用于抗感染和抗肿瘤药物的开发。在科研领域, 可作为激酶抑制剂或信号通路调节剂的候选分子。此外, 在农用化学品研发中, 可能用于设计新型杀菌剂或杀虫剂。具体实验用途包括: 体外活性筛选、结构-活性关系 (SAR) 研究, 以及作为有机合成砌块构建更复杂的杂环体系。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、避光、干燥条件下长期储存, 短期使用可存放于 $2-8^{\circ}C$ 环境。开封后需充惰性气体 (如氮气) 保护, 防止氧化。使用时需在通风橱中操作, 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 DMSO、DMF 等极性有机溶剂, 水溶性较差, 建议先用少量有机溶剂助溶后再用缓冲液稀释。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 批次间稳定性良好。MS 和 NMR 数据可供验证结

构。安全提示：可能引起眼睛和皮肤刺激，操作时需佩戴防护手套、护目镜及实验服。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应作为有害化学品处理，遵守当地环保法规。建议在 MSDS 指导下使用，储存区域应远离氧化剂和强酸强碱。