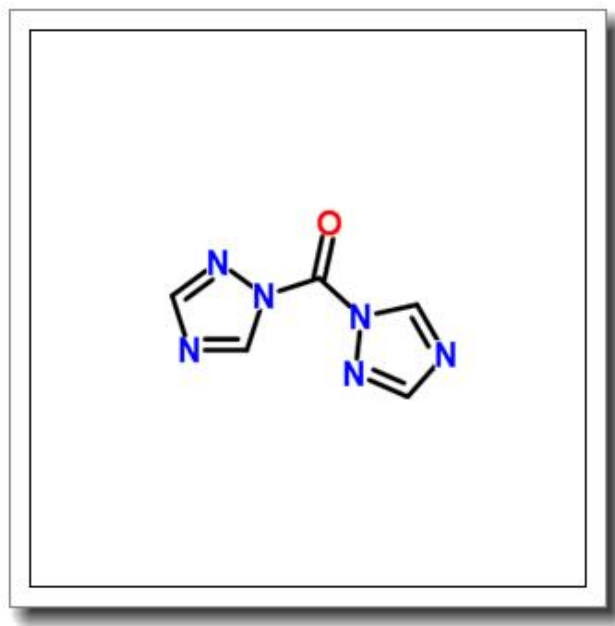


# N,N'-羰基二(1,2,4-三氮唑)

*1, 1'-Carbonyl-di (1, 2, 4-triazole)*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	1, 1'-Carbonyl-di (1, 2, 4-triazole)
中文名称	N, N'-羰基二(1, 2, 4-三氮唑)
CAS 号	41864-22-6
分子式	C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> N <sub>6</sub> O
分子量	164. 125
纯度	≥ 96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

N,N'-羰基二(1,2,4-三氮唑) (CAS 号: 41864-22-6) 是一种含氮杂环化合物, 分子式为 C<sub>5</sub>H<sub>4</sub>N<sub>6</sub>O, 分子量为 164.125。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在, 纯度通常不低于 96%。其结构中的羰基桥连两个 1,2,4-三氮唑环, 赋予其独特的反应活性, 尤其在缩合反应和杂环合成中表现出高选择性。该试剂易溶于极性有机溶剂 (如 DMF、DMSO), 但在水中溶解度较低, 需注意其水解敏感性。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为三氮唑类衍生物, 该化合物在生物化学领域主要作为多功能合成砌块, 参与核苷酸类似物和药物中间体的构建。其羰基和三氮唑结构可模拟生物体内某些酶底物的过渡态, 因此在酶抑制剂设计和药物开发中具有潜在价值。此外, 它还能作为蛋白质交联剂或小分子探针的合成前体, 用于化学生物学研究。

### 3. 主要应用领域与具体用途

在有机合成中, N,N'-羰基二(1,2,4-三氮唑) 常用于羧酸活化, 高效生成活性酯中间体, 进而与胺类反应制备酰胺键。医药领域用于抗病毒药物 (如阿昔洛韦类似物) 及抗癌先导化合物的合成。材料科学中可作为聚合物交联剂或功能化单体。具体实验包括: 肽链延伸、杂环化合物库构建, 以及作为金属配体的前体。

### 4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光条件下储存, 温度控制在 2-8° C, 长期保存需充惰性气体保护。开封后需密封防潮, 避免与水分或强氧化剂接触。使用时应在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解建议使用无水 DMF 或乙腈, 反应体系需严格除水以提高效率。

### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 ≥96%, 并提供批次相关的核磁 (NMR) 和质谱 (MS) 数据支持。安全信息显示其具有刺激性, 可能引起皮肤、眼睛和呼吸道不适。操作时需遵守 GHS 分类: H315 (造成皮肤刺激)、H319 (造成严重眼刺激)。若不慎接

触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地法规，建议通过专业化学品回收渠道处置。