



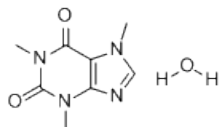
本PDF文件由

免费提供, 全部信息请点击[5743-12-4](#), 若要查询其它化学品请登录[CAS号查询网](#)如果您觉得本站对您的学习工作有帮助, 请与您的朋友一起分享:) [爱化学www.ichemistry.cn](#)

CAS Number:5743-12-4 基本信息

中文名:	咖啡因(一水); 1,3,7-三甲基黄嘌呤;甲基可可豆碱;咖啡碱;茶素
英文名:	1H-Purine-2,6-dione,3,7-dihydro-1,3,7-trimethyl-, hydrate (1:1)
别名:	1H-Purine-2,6-dione,3,7-dihydro-1,3,7-trimethyl-, monohydrate (9CI); Caffeine, monohydrate (8CI)

分子结构:

分子式: $C_8H_{12}N_4O_3$

分子量: 212.21

CAS登录号: 5743-12-4

EINECS登录号: 200-362-1

物理化学性质

性质描述:	咖啡因(一水) (5743-12-4) 的性状: 白色粉末或有光泽的针状结晶。味苦。在空气中能风化。溶于水(1:46)、 乙醇 (1:75)。无水物: 熔点238℃; d_4^{18} 1.23。LD ₅₀ 雄小鼠, 仓鼠, 大鼠, 兔口服: 127, 230, 355, 246mg/kg; 雌小鼠, 仓鼠, 大鼠, 兔口服: 137, 249, 247, 224mg/kg。
-------	--

安全信息

安全说明:	S16: 远离火源。 S45: 出现意外或者感到不适, 立刻到医生那里寻求帮助(最好带去产品容器标签)。
危险类别码:	R22: 吞咽有害。

CAS#5743-12-4化学试剂供应商(点击生产商链接可查看价格)

供应商信息已更新, 请登录爱化学 [CAS No. 5743-12-4 查看](#)
 若您在此化学品供应商, 请按照[化工产品收录](#)说明进行免费添加

其他信息

产品应用:	咖啡因(一水) (5743-12-4) 的用途: 测定 锑 、 铋 、 金 、 钯 。
生产方法及其他:	咖啡因(一水) (5743-12-4) 的制法: 由 氯乙酸 经中和、氧化、 酸化 得到 氧乙酸 , 然后与尿素缩合得氧乙酰脲, 再经环合、酸化、亚硝化、还原、酰化、甲基化得到咖啡因。 影响: 通常对水是不危害的, 若无政府许可, 勿将材料排入周围环境。 贮存: 常温常压下稳定, 2-8℃ 避光, 阴凉干燥处, 密封保存。 其他: 1、氢键供体数量: 1;

	2、氢键受体数量：5； 3、可旋转化学键数量：0； 4、拓扑分子极性表面积 (TPSA)：59.4。
相关化学品信息	
2,5-二异辛基对苯二酚 丁氯柳胺 2,3,4,6-四乙酰氧基-α-D-吡喃葡萄糖溴化物 硫酸氧锆 碳酸钴水合物 574-39-0 2-甲基-2-丙烯酸与2-甲基-2-丙烯酸2-羟基丙基酯和2-甲基-2-丙烯酸甲酯的聚合物 5758-19-0 57456-71-0 57206-81-2 1-叔丁氧基-2-丙醇 2-氯-3-(二溴甲基)噻吩 安扑丁 苯磺保泰松 BOC-D-4-氯苯丙氨酸 硝酸铷 Fe304 阿德福韦酯价格 531	