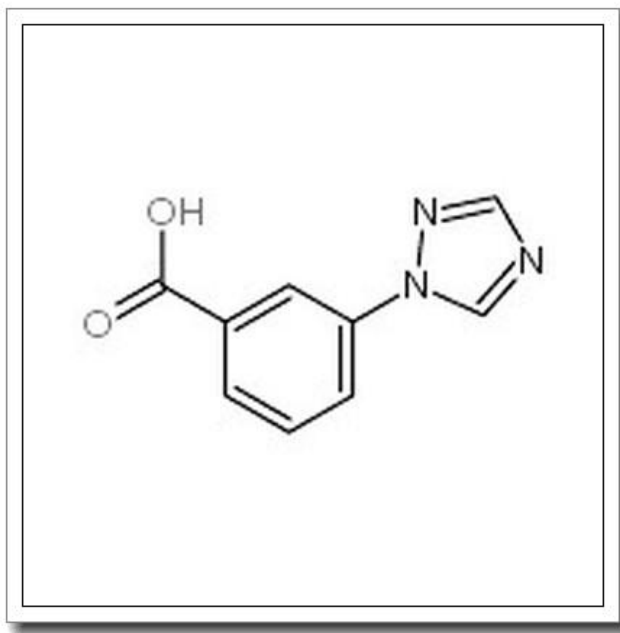


3-(1,2,4-三氮唑-1-基)苯甲酸

3-(1,2,4-Triazol-1-yl)benzoic Acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-(1,2,4-Triazol-1-yl)benzoic Acid
中文名称	3-(1,2,4-三氮唑-1-基)苯甲酸
CAS 号	167626-64-4
分子式	C ₉ H ₇ N ₃ O ₂
分子量	189.171
纯度	>96%

产品说明

3-(1, 2, 4-三氮唑-1-基) 苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-(1, 2, 4-Triazol-1-yl)benzoic Acid 是一种有机杂环化合物，化学式为 C₉H₇N₃O₂，分子量 189.171。该化合物由苯甲酸骨架与 1, 2, 4-三氮唑基团通过碳氮键连接而成，CAS 号为 167626-64-4。其纯度经高效液相色谱（HPLC）验证大于 96%，外观通常为白色至类白色结晶性粉末。该物质在常温下稳定，微溶于水，易溶于极性有机溶剂如甲醇、二甲基亚砷（DMSO）。

2. 生物化学功能与重要性

作为三氮唑类衍生物，该化合物具有显著的生物活性，尤其是作为医药中间体和酶抑制剂的核心结构。三氮唑基团能通过氢键和疏水相互作用与生物靶点结合，常用于设计抗真菌、抗肿瘤及抗炎药物。其苯甲酸结构进一步增强了分子与受体的亲和力，在药物化学中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域，本品常用于合成新型三氮唑类抗真菌药物（如氟康唑类似物）或激酶抑制剂。农业化学中可作为杀菌剂前体。此外，在材料科学中，其杂环结构可用于构建金属有机框架（MOFs）或功能性高分子材料。实验室中亦用作标准品或生化探针。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、避光环境中，长期储存温度应低于-20℃。开封后需充惰性气体保护以防降解。使用时需在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解推荐使用 DMSO 或碱性水溶液（pH>8），工作浓度需根据实验体系优化。

5. 质量控制与安全信息

本产品经核磁共振（NMR）和质谱（MS）验证结构，HPLC 检测纯度≥96%。安全数据表明其对眼睛和皮肤有轻微刺激性，操作时应佩戴防护手套及护目镜。若发生接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。

注：以上信息基于现有研究数据，具体应用需进一步实验验证。