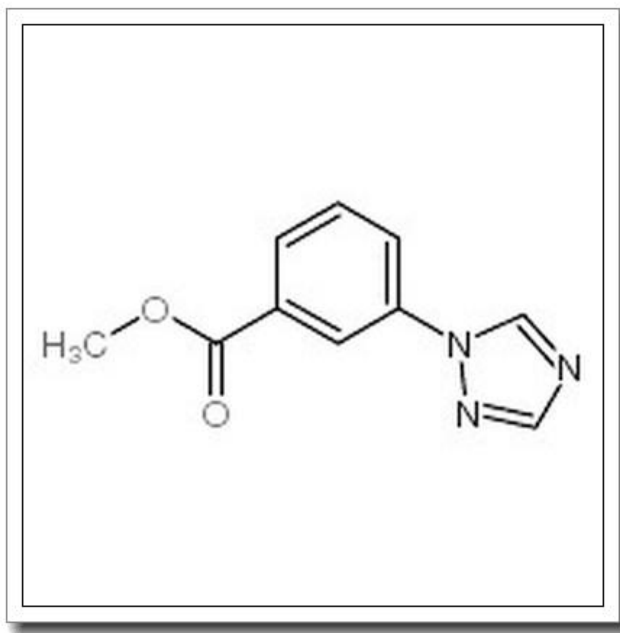


# 3-(1H-1,2,4-噁唑-1-基)苯甲酸甲酯

*methyl 3-(1,2,4-triazol-1-yl)benzoate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 3-(1,2,4-triazol-1-yl)benzoate
中文名称	3-(1H-1,2,4-噁唑-1-基)苯甲酸甲酯
CAS 号	167626-27-9
分子式	C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>
分子量	203.197
纯度	>96%

## 产品说明

### 3-(1H-1,2,4-三唑-1-基)苯甲酸甲酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 methyl 3-(1,2,4-triazol-1-yl)benzoate，分子式 C<sub>10</sub>H<sub>9</sub>N<sub>3</sub>O<sub>2</sub>，分子量 203.197，CAS 登记号 167626-27-9。其结构中包含苯甲酸甲酯骨架与 1,2,4-三唑杂环，赋予其独特的极性和氢键结合能力。该化合物易溶于有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO，但在水中溶解度较低。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，符合常规合成与研发标准。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为三唑类衍生物，该化合物可通过杂环氮原子与生物分子中的活性位点结合，表现出潜在的酶抑制或受体调节作用。其苯甲酸酯结构可增强细胞膜穿透性，在药物化学中常用于先导化合物的结构修饰。三唑基团的引入能显著提升分子的稳定性和代谢抗性，是设计抗真菌、抗肿瘤或抗炎药物的关键药效团之一。

#### 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，特别适用于开发新型三唑类抗真菌药物（如类似氟康唑的衍生物）。在农药领域，可作为杀菌剂或植物生长调节剂的合成前体。此外，在材料科学中可用于制备含氮杂环的功能性高分子单体。实验室研究中常用于探索杂环化合物的构效关系或作为分子探针使用。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 2-8℃ 干燥环境中，避免光照和潮湿。开封后需充入惰性气体保护，长期储存建议分装并冷冻（-20℃）。使用前需恢复至室温并短暂离心以去除可能吸潮结块。溶解时优先选用无水 DMSO 或乙醇，配制溶液建议现配现用，避免反复冻融。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱（MS）和核磁共振（NMR）验证结构，批次间一致性通过 HPLC 监控。操作时需佩戴防护手套和护目镜，避免吸入粉尘或接触皮肤。如意外接触，立即用

大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物应作为有害化学品处置，遵守当地环保法规。安全数据表（SDS）可随货提供或联系供应商获取。