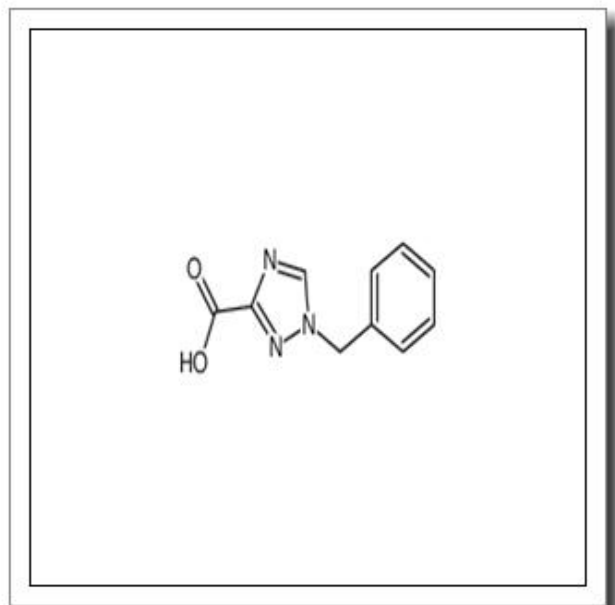


1-benzyl-1,2,4-triazole-3-carboxylic acid

1-benzyl-1,2,4-triazole-3-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-benzyl-1,2,4-triazole-3-carboxylic acid
中文名称	1-benzyl-1,2,4-triazole-3-carboxylic acid
CAS 号	138624-97-2
分子式	C10H9N3O2
分子量	203.197
纯度	≥ 96%

产品说明

1-苄基-1,2,4-三唑-3-羧酸产品说明书

产品概述与化学特性

1-苄基-1,2,4-三唑-3-羧酸 (CAS 号: 138624-97-2) 是一种含氮杂环羧酸衍生物, 分子式为 $C_{10}H_9N_3O_2$, 分子量 203.197。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在, 纯度 $\geq 96\%$, 具有三唑环的典型化学稳定性与羧酸基团的反应活性。其结构中苄基的引入增强了脂溶性, 使其在有机溶剂中表现出良好的溶解性, 同时三唑环赋予其配位能力和生物活性。

生物化学功能与重要性

作为三唑类化合物的代表性衍生物, 该产品通过三唑环与生物靶点的氢键相互作用及金属离子螯合能力, 在酶抑制和分子识别中发挥重要作用。羧酸基团可进一步衍生化为酯、酰胺等活性结构, 是构建药物先导化合物的关键药效团。其独特的杂环-芳香杂化结构对跨膜传输和生物利用度具有显著影响。

主要应用领域与具体用途

1. 医药中间体: 用于合成抗真菌、抗病毒及抗肿瘤药物, 尤其作为三唑类抗菌剂的核心骨架
2. 农药开发: 作为植物生长调节剂和杀菌剂的活性组分前体
3. 材料科学: 制备金属有机框架 (MOF) 材料的有机配体
4. 生化研究: 用于蛋白酶抑制机制研究和受体结合实验的探针分子

储存条件与使用建议

建议在 $2-8^{\circ}\text{C}$ 干燥避光条件下保存, 长期储存需充惰性气体保护。开封后建议分装使用, 避免反复冻融。使用时应佩戴防护手套和护目镜, 在通风橱中操作。溶解推荐使用 DMF 或 DMSO 等极性非质子溶剂, 水溶液需调节 pH 至碱性以增强溶解性。

质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度, 批号关联完整分析证书 (COA)。急性毒性数据 LD_{50} (大鼠经口) $> 500 \text{ mg/kg}$, 属于刺激性化学品。避免与强氧化剂接触, 如发生皮肤

接触应立即用大量清水冲洗。废弃物处理需符合危险化学品处置规范，建议通过专业机构进行无害化处理。