

1-naphthalen-1-yltriazole-4-carboxylic acid

1-naphthalen-1-yltriazole-4-carboxylic acid

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	1-naphthalen-1-yltriazole-4-carboxylic acid
中文名称	1-naphthalen-1-yltriazole-4-carboxylic acid
CAS 号	113423-89-5
分子式	C ₁₃ H ₉ N ₃ O ₂
分子量	239.229
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-naphthalen-1-yltriazole-4-carboxylic acid (CAS 号: 113423-89-5) 是一种含萘基和三唑环的羧酸衍生物, 分子式为 $C_{13}H_9N_3O_2$, 分子量为 239.229。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有良好的化学稳定性。其结构中萘环与三唑环的共轭体系赋予其独特的电子分布特性, 使其在配位化学和生物活性分子设计中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物可作为有机合成中间体, 其羧酸基团易于衍生化为酯、酰胺等官能团, 三唑环则能参与点击化学反应。在生物化学领域, 其结构特征使其可能作为酶抑制剂或金属离子螯合剂, 尤其在抗肿瘤和抗菌药物研发中具有潜在应用价值。萘环的疏水性特性可增强其与生物膜或蛋白质疏水口袋的相互作用。

3. 主要应用领域与具体用途

1-naphthalen-1-yltriazole-4-carboxylic acid 主要用于以下领域:

- 医药研发: 作为先导化合物用于设计新型抗菌、抗炎或抗肿瘤药物
- 材料科学: 用于合成功能性高分子材料或金属有机框架 (MOFs)
- 分析化学: 作为荧光探针或色谱分析的标准品
- 农药开发: 作为杀虫剂或杀菌剂的活性组分前体

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光保存, 长期储存需充惰性气体保护。开封后应密封防潮, 避免反复冻融。使用时需在干燥环境下操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明, 该化合物易溶于 DMSO、DMF 等极性有机溶剂, 微溶于水 (需调节 pH 至碱性)。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 重金属含量 $< 10\text{ppm}$ 。安全数据表明, 该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性, 操作应在通风橱中进行。如接触皮肤, 立即用大量清水冲

洗。废弃物处理需符合当地化学品管理法规，不可直接排入下水道。详细毒理学数据可参考材料安全数据表（MSDS）。