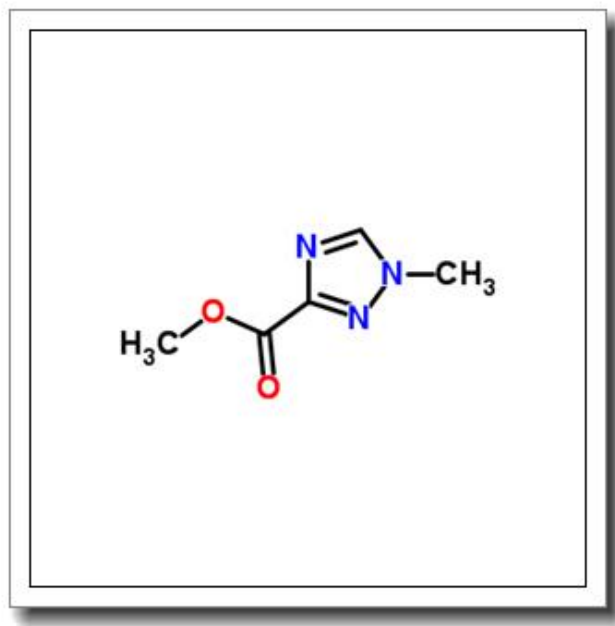


# 1-甲基-1H-1,2,4-三唑-3-甲酸甲酯

*methyl 1-methyl-1,2,4-triazole-3-carboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 1-methyl-1,2,4-triazole-3-carboxylate
中文名称	1-甲基-1H-1,2,4-三唑-3-甲酸甲酯
CAS 号	57031-66-0
分子式	C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>
分子量	141.128
纯度	≥96%

## 产品说明

### 1-甲基-1H-1,2,4-三唑-3-甲酸甲酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

1-甲基-1H-1,2,4-三唑-3-甲酸甲酯 (methyl 1-methyl-1,2,4-triazole-3-carboxylate) 是一种含氮杂环化合物，化学式为  $C_5H_7N_3O_2$ ，分子量为 141.128，CAS 号为 57031-66-0。本品为白色至类白色结晶或粉末，纯度  $\geq 96\%$ ，具有三唑环的典型化学稳定性，可溶于常见有机溶剂如甲醇、乙醇和乙腈，微溶于水。其结构中的酯基和三唑环赋予其良好的反应活性，适合作为有机合成中间体。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为三唑类衍生物，在生物化学领域具有显著意义。三唑环结构广泛存在于药物和农药活性分子中，能够通过氢键或配位作用与生物靶标结合。其酯基可进一步水解为羧酸，或参与缩合反应，是构建复杂分子的关键模块。在药物研发中，此类结构常用于抗菌、抗真菌及抗肿瘤先导化合物的设计。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药和农药中间体的合成。在医药领域，可作为抗感染药物（如三唑类抗真菌剂）的合成前体；在农药领域，用于制备植物生长调节剂或杀虫剂。此外，在材料科学中，可用于开发含氮杂环高分子材料。实验室中常作为标准品或反应底物，用于杂环化学机理研究。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、阴凉处（2-8°C），避免光照与潮湿环境。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时应在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解时建议优先选用极性有机溶剂，并通过薄层色谱（TLC）或高效液相色谱（HPLC）监测反应进程。

#### 5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ ，水分含量  $\leq 0.5\%$ ，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据

表明，其对眼睛和皮肤有轻微刺激性，操作时需佩戴防护手套和护目镜。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照危险化学品规范处置。

（注：本说明基于现有实验数据，实际应用前请查阅最新文献或进行小试验证。）