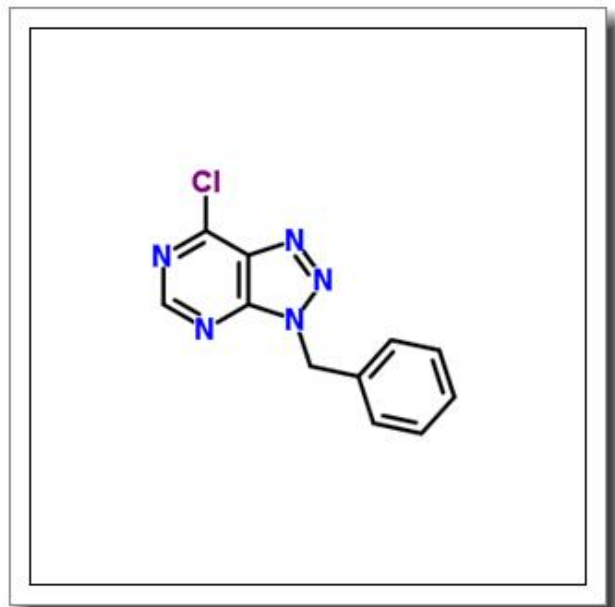


# 3-苄基-7-氯-3H-[1,2,3]-噻唑并[4,5-d]嘧啶

*3-benzyl-7-chlorotriazolo[4,5-d]pyrimidine*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	3-benzyl-7-chlorotriazolo[4,5-d]pyrimidine
中文名称	3-苄基-7-氯-3H-[1,2,3]-噻唑并[4,5-d]嘧啶
CAS 号	21410-06-0
分子式	C <sub>11</sub> H <sub>8</sub> ClN <sub>5</sub>
分子量	245.668
纯度	≥96%

## 产品说明

### 3-苄基-7-氯-3H-[1, 2, 3]-噻唑并[4, 5-d]嘧啶产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶粉末，化学名称为 3-benzyl-7-chlorotriazolo[4, 5-d]pyrimidine，CAS 号为 21410-06-0，分子式 C<sub>11</sub>H<sub>8</sub>ClN<sub>5</sub>，分子量 245.668。其结构中含苄基、氯取代基及三唑并嘧啶杂环，赋予其独特的电子分布和反应活性。纯度 ≥96% (HPLC)，易溶于二甲基亚砜 (DMSO)，微溶于甲醇、乙醇，不溶于水。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为杂环衍生物，可通过干扰核酸代谢或酶活性发挥生物效应。其嘧啶环结构可模拟天然嘌呤/嘧啶碱基，而氯原子的引入增强了其与生物大分子的亲电结合能力。在药物化学中，此类结构常作为激酶抑制剂或抗病毒药物的核心骨架。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域，本品是合成抗肿瘤、抗感染先导化合物的关键中间体，尤其适用于蛋白激酶抑制剂的结构修饰。农业化学中可用于新型杀虫剂开发。实验室研究方面，可作为荧光标记物或分子探针的构建模块。

#### 4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃、避光、干燥的惰性气体环境中，开封后需充氮密封。建议使用前室温平衡 30 分钟以避免吸湿。溶解时优先选用 DMSO (浓度 ≤10mM)，后续可用缓冲液稀释。操作时需佩戴防尘口罩、丁腈手套及护目镜。

#### 5. 质量控制与安全信息

批次质检包括 HPLC 纯度分析、LC-MS 结构验证及水分含量测试 (≤0.5%)。安全数据：急性毒性 (口服大鼠 LD<sub>50</sub>) >500mg/kg，皮肤刺激性类别 3。废弃物应作为有害化学品处置，避免与强氧化剂接触。

(注：本说明基于现有研究数据，实际应用需结合具体实验条件验证。)