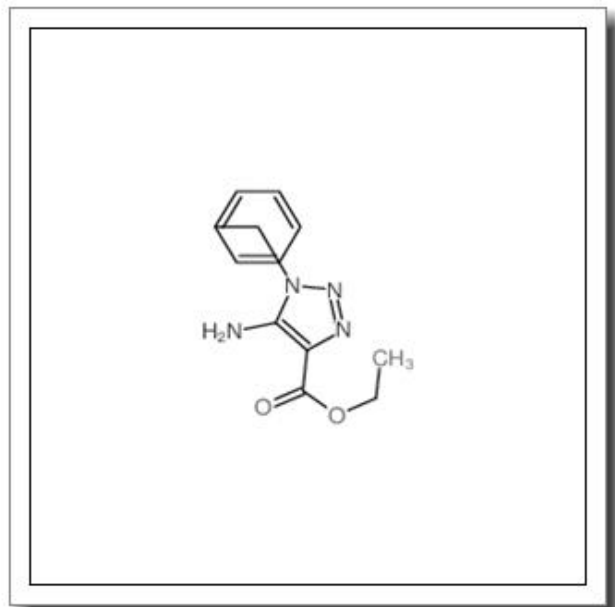


# 5-氨基-1-苄基-1H-1,2,3-噁唑-4-羧酸乙酯

*ethyl 5-amino-1-benzyltriazole-4-carboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 5-amino-1-benzyltriazole-4-carboxylate
中文名称	5-氨基-1-苄基-1H-1, 2, 3-噁唑-4-羧酸乙酯
CAS 号	20271-33-4
分子式	C <sub>12</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>
分子量	246.265
纯度	≥96%

## 产品说明

### 5-氨基-1-苄基-1H-1, 2, 3-噁唑-4-羧酸乙酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 ethyl 5-amino-1-benzyltriazole-4-carboxylate, CAS 号为 20271-33-4, 分子式为 C<sub>12</sub>H<sub>14</sub>N<sub>4</sub>O<sub>2</sub>, 分子量 246.265。外观通常为白色至淡黄色结晶或粉末, 纯度 ≥96%。该化合物属于 1, 2, 3-三唑类衍生物, 兼具氨基和酯基官能团, 具有显著的极性及中等溶解性 (易溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇, 微溶于水)。其结构中的三唑环与苄基侧链赋予其独特的化学稳定性和反应活性。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为三唑类化合物的关键中间体, 该分子可通过进一步修饰参与杂环合成、金属配位或生物活性分子构建。其氨基和酯基可作为反应位点, 用于合成抗菌、抗肿瘤或抗炎药物前体。在药物化学中, 三唑骨架常作为药效团, 通过氢键或  $\pi-\pi$  堆积作用与生物靶标结合, 因此在先导化合物优化中具有重要价值。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发和有机合成领域。具体用途包括: 1) 作为抗感染药物 (如硝基咪唑类) 的合成中间体; 2) 用于构建含三唑结构的蛋白激酶抑制剂; 3) 在材料科学中制备功能性配体或荧光探针。此外, 其衍生物可能应用于农用化学品或高分子材料的改性研究。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、避光环境中, 温度控制在 2-8° C 以延长稳定性。开封后需充惰性气体保护, 避免吸湿或氧化。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试推荐优先选用 DMSO, 工作液建议现配现用, 避免长期储存导致水解。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, MS 和 NMR 验证结构。潜在危害包括: 1) 可能引起皮肤或眼睛刺激; 2) 吸入粉尘可能导致呼吸道不适。应急处理措施: 接触皮肤时

立即用大量清水冲洗，误食需就医。安全数据表（SDS）可随货提供，运输分类为非危险品，但建议按一般化学品规范管理。

注：具体实验方案请根据实际研究需求调整，并遵守所在机构的实验室安全规程。