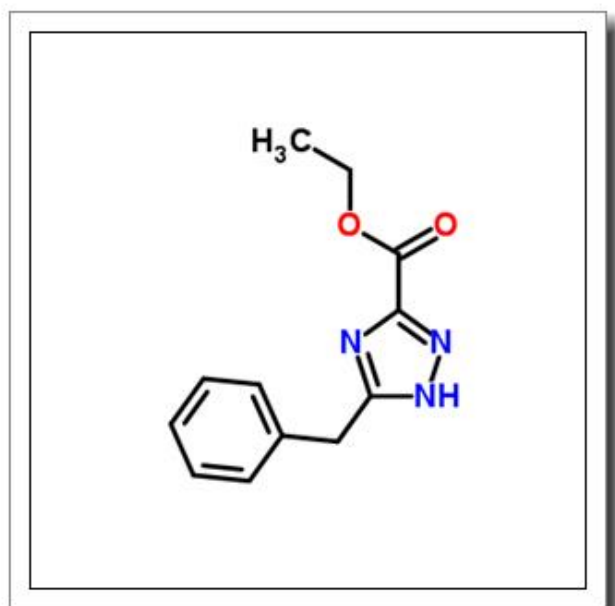


Ethyl 5-benzyl-1H-1,2,4-triazole-3-carboxylate

Ethyl 5-benzyl-1H-1,2,4-triazole-3-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 5-benzyl-1H-1,2,4-triazole-3-carboxylate
中文名称	Ethyl 5-benzyl-1H-1,2,4-triazole-3-carboxylate
CAS 号	648430-85-7
分子式	C ₁₂ H ₁₃ N ₃ O ₂
分子量	231.251
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

Ethyl 5-benzyl-1H-1,2,4-triazole-3-carboxylate (CAS 号: 648430-85-7) 是一种有机化合物, 分子式为 $C_{12}H_{13}N_3O_2$, 分子量为 231.251。该化合物属于 1,2,4-三唑类衍生物, 结构中包含苯甲基和乙酯基团, 赋予其独特的化学性质。其纯度为 96% 以上, 外观通常为白色至类白色结晶或粉末。该物质在常温下稳定, 可溶于常见有机溶剂如甲醇、乙醇和二甲基亚砷 (DMSO), 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为一种三唑类化合物, Ethyl 5-benzyl-1H-1,2,4-triazole-3-carboxylate 在生物化学领域具有重要作用。三唑环结构是其活性核心, 能够参与多种生物分子的相互作用, 尤其是作为酶抑制剂或配体的潜在功能。该化合物在药物化学和材料科学中常被用作中间体, 用于合成更复杂的生物活性分子或功能材料。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药研发和有机合成领域。在药物化学中, 它可作为合成抗真菌、抗病毒或抗肿瘤药物的关键中间体。此外, 由于其独特的结构, 它也被用于开发新型农药和功能材料。在实验室研究中, 该化合物常用于探索三唑类衍生物的结构-活性关系, 为新药设计提供理论依据。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于干燥、阴凉的环境中, 避免阳光直射。储存温度应控制在 2-8°C, 以保持其长期稳定性。使用时需在通风良好的条件下操作, 避免直接接触皮肤或眼睛。建议佩戴防护手套和护目镜, 并在使用后彻底清洗双手。开封后应尽快使用, 剩余部分需密封保存以防吸湿或降解。

5. 质量控制与安全信息

本产品经过严格的质量控制, 确保纯度 $\geq 96\%$ (HPLC 检测)。在使用前, 建议通过核磁共振 (NMR) 或质谱 (MS) 进一步验证其结构。安全信息方面, 该化合物可能

对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应避免吸入粉尘或接触黏膜。如不慎接触，应立即用大量清水冲洗，并寻求医疗帮助。废弃物应按照当地法规处理，不可随意丢弃。