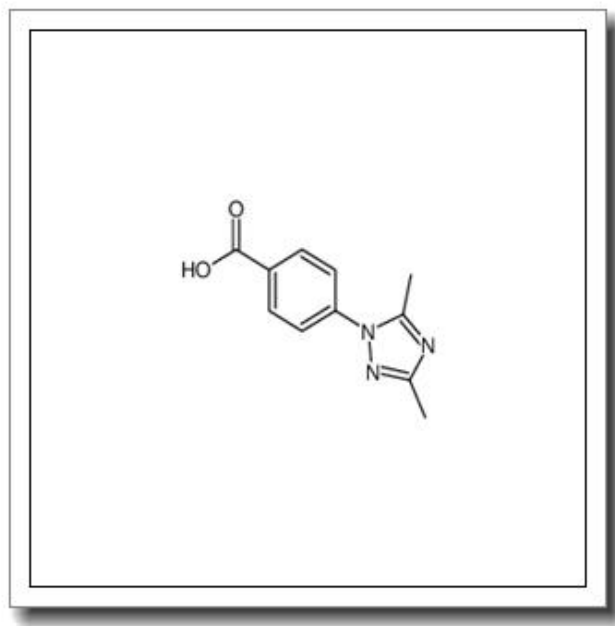


产品_3807

4-(3,5-dimethyl-1,2,4-triazol-1-yl)benzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-(3,5-dimethyl-1,2,4-triazol-1-yl)benzoic acid
中文名称	产品_3807
CAS 号	858003-28-8
分子式	C ₁₁ H ₁₁ N ₃ O ₂
分子量	217.224
纯度	≥96%

产品说明

4-(3,5-二甲基-1,2,4-三唑-1-基)苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 4-(3,5-二甲基-1,2,4-三唑-1-基)苯甲酸 (产品编号 3807), CAS 号为 858003-28-8, 分子式为 $C_{11}H_{11}N_3O_2$, 分子量 217.224。外观为白色至类白色结晶粉末, 纯度 $\geq 96\%$ 。该化合物属于苯甲酸衍生物, 结构中包含 1,2,4-三唑杂环和羧酸官能团, 兼具芳香族化合物的稳定性和三唑环的生物活性特征, 可溶于 DMSO、甲醇等有机溶剂, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为三唑类化合物, 其分子中的氮杂环结构赋予其配位能力和生物活性, 羧酸基团则提供了进一步化学修饰的位点。在生物化学研究中, 该分子可作为酶抑制剂设计的核心骨架, 或通过羧基与其他生物分子偶联, 用于探针合成和药物开发。其结构特性对研究蛋白质-配体相互作用具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于医药研发和生物化学研究领域。具体用途包括: 作为小分子抑制剂用于激酶或蛋白酶活性研究; 作为中间体参与抗肿瘤、抗真菌药物的合成; 在材料科学中用于构建金属有机框架 (MOF) 材料。此外, 其衍生物可能应用于农药开发和分子影像学标记物制备。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20°C 干燥环境中, 避免光照和潮湿。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用前需恢复至室温并短暂离心。实验操作建议在通风橱中进行, 配制溶液时优先选用 DMSO 作为溶剂, 并根据实验需求进一步稀释。长期储存建议定期检测纯度。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, MS 和 NMR 验证结构准确性。安全数据表明其对眼睛和皮肤有轻微刺激性, 操作时需佩戴防护眼镜和手套。若不慎接触, 立即用大量

清水冲洗并就医。废弃物处理需符合危险化学品管理条例。详细安全信息请参阅随货提供的MSDS文件。

注：本产品仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。