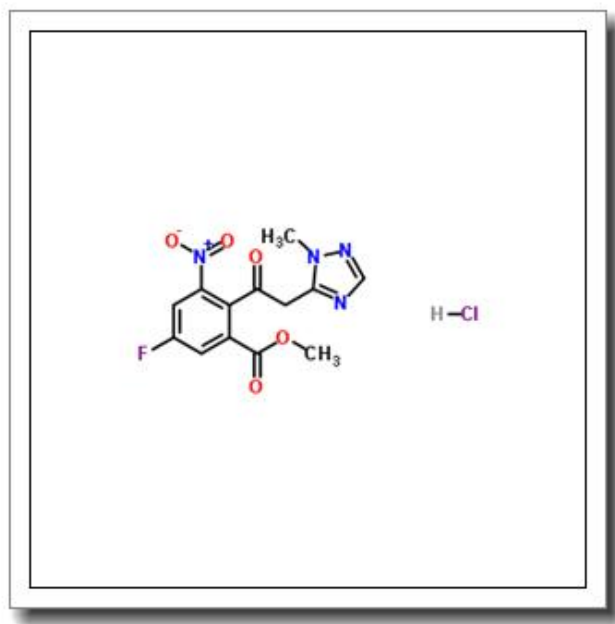


产品_6953

Methyl 5-fluoro-2-[(1-methyl-1H-1,2,4-triazol-5-yl)acetyl]-3-nitrobenzoate hydrochloride (1:1)



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 5-fluoro-2-[(1-methyl-1H-1,2,4-triazol-5-yl)acetyl]-3-nitrobenzoate hydrochloride (1:1)
中文名称	产品_6953
CAS 号	1322616-35-2
分子式	C13H12ClFN4O5
分子量	358.71
纯度	≥96%

产品说明

产品_6953 (化学名称: Methyl 5-fluoro-2-[(1-methyl-1H-1,2,4-triazol-5-yl)acetyl]-3-nitrobenzoate hydrochloride (1:1)) 是一种高纯度有机化合物, CAS 号为 1322616-35-2, 分子式为 C₁₃H₁₂C₁FN₄O₅, 分子量为 358.71。该化合物为盐酸盐形式, 纯度不低于 96%, 具有稳定的化学性质, 常温下为白色至类白色固体。其结构中含有氟原子、硝基和 1,2,4-三唑环, 这些官能团赋予其独特的反应活性和生物活性。

1. 产品概述与化学特性

产品_6953 是一种含氟硝基苯甲酸酯衍生物, 兼具芳香族化合物和杂环化合物的特性。其分子中的 1,2,4-三唑环和硝基苯甲酸酯结构使其在药物化学和生物化学领域具有重要价值。该化合物在极性有机溶剂中溶解性较好, 但在水中溶解度较低, 需注意其盐酸盐形式可能对 pH 敏感。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其独特的结构, 可能作为酶抑制剂或受体配体的中间体, 在生物活性分子研究中发挥重要作用。氟原子的引入可增强其脂溶性和代谢稳定性, 而三唑环则可能参与氢键相互作用, 影响其与生物靶标的结合能力。

3. 主要应用领域与具体用途

产品_6953 主要用于医药研发领域, 可作为合成抗真菌、抗肿瘤或抗炎药物的关键中间体。其具体用途包括但不限于: 新药开发中的结构修饰、药物筛选中的活性分子构建, 以及生物化学研究中的工具化合物。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光干燥储存, 长期保存需充惰性气体保护。使用时需在干燥环境下操作, 避免与强氧化剂接触。溶解建议使用二甲基亚砜 (DMSO) 或甲醇等有机溶剂, 配制溶液后建议尽快使用。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度 ≥ 96%。使用时需穿戴防护装备, 避免吸入或皮肤接

触。其安全数据表明可能对眼睛和皮肤有刺激性，操作应在通风橱中进行。废弃物应按照危险化学品处理规范处置。

本产品仅供科研用途，不适用于人体或动物直接使用。具体应用前建议查阅相关文献并开展必要的安全性评估。