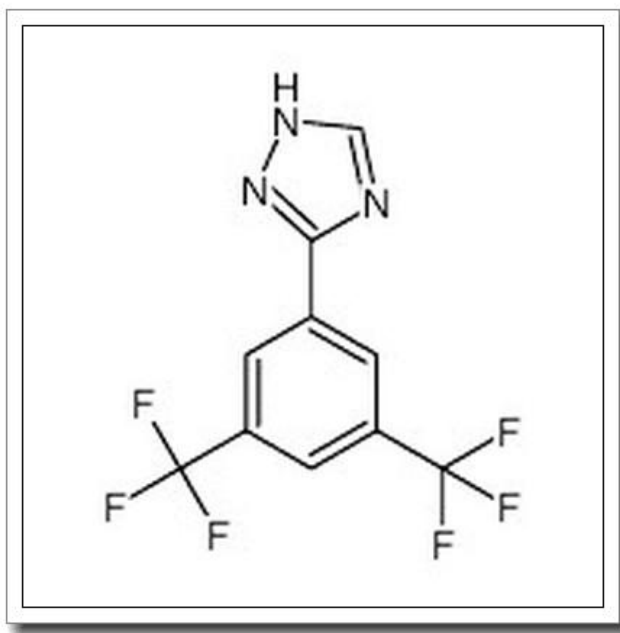


3-(3,5-bis(trifluoromethyl)phenyl)-1H-1,2,4-triazole

3-(3,5-bis(trifluoromethyl)phenyl)-1H-1,2,4-triazole



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-(3,5-bis(trifluoromethyl)phenyl)-1H-1,2,4-triazole
中文名称	3-(3,5-bis(trifluoromethyl)phenyl)-1H-1,2,4-triazole
CAS 号	1333154-10-1
分子式	C ₁₀ H ₅ F ₆ N ₃
分子量	281.157
纯度	>96%

产品说明

3-(3,5-双(三氟甲基)苯基)-1H-1,2,4-三唑产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为含氟芳香族三唑类化合物，化学名称为 3-(3,5-双(三氟甲基)苯基)-1H-1,2,4-三唑，CAS 号为 1333154-10-1。其分子式为 C₁₀H₅F₆N₃，分子量 281.157，纯度高于 96%。该化合物具有显著的疏水性和电子效应，三氟甲基的强吸电子特性使其在芳香环上形成高反应活性位点，而 1,2,4-三唑基团则赋予其配位能力和生物活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为三唑类衍生物，该化合物可通过氢键和 $\pi-\pi$ 堆积作用与生物分子相互作用。其结构中的三唑环可作为金属离子螯合剂或酶抑制剂的核心骨架，三氟甲基苯基则能增强细胞膜穿透性。这类结构在药物化学中常用于设计抗真菌、抗肿瘤及抗炎靶向分子，也是有机合成中重要的中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域，本品可用于激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂的先导化合物优化。材料科学中，其含氟特性可用于制备液晶材料或耐高温聚合物单体。此外，在农用化学品开发中，可作为杀菌剂或杀虫剂的活性组分前体。实验室中常用于研究含氟芳环与杂环的协同效应机制。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20°C、避光、干燥惰性气体环境下长期储存，开封后需充氩气密封。使用前需恢复至室温以避免结露。溶解性测试表明其在 DMSO 和 DMF 中溶解度良好 (>50 mg/mL)，水溶性低 (<0.1 mg/mL)。实验操作建议在通风橱中进行，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 归一化法检测纯度 $\geq 96\%$ ，核磁共振 (¹H NMR、¹⁹F NMR) 和质谱 (HRMS) 验证结构。安全数据表明其急性毒性 (LD₅₀ 大鼠口服) >500 mg/kg，但

可能对眼睛和呼吸道产生刺激。操作时需佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套，溢出处理应使用惰性吸附材料。废弃物需按危险化学品规范处置。

注：具体实验方案请结合文献方法优化，本说明数据基于实验室级样品测试结果，批量应用前建议进行全项质检。