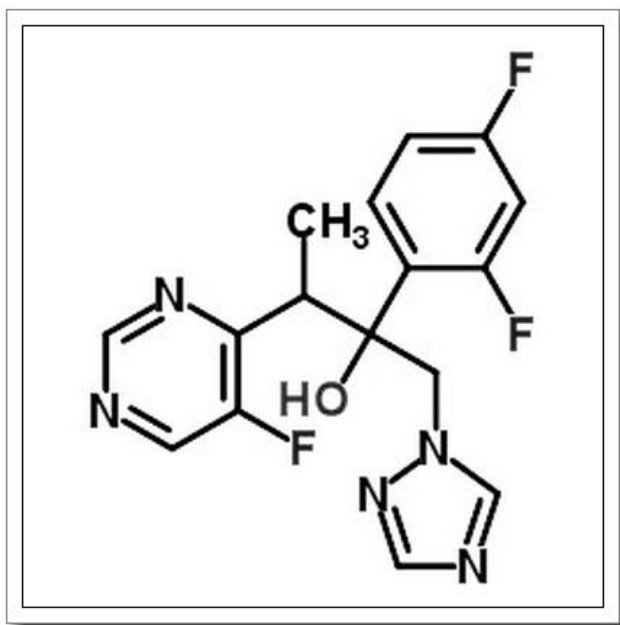


A-(2,4-二氟苯基)-5-氟-B-甲基-A-(1,2,4-三唑-1-甲基)-4- 嘧啶乙醇

2-(2,4-Difluorophenyl)-3-(5-fluoro-4-pyrimidinyl)-1-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)-2-butanol



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(2,4-Difluorophenyl)-3-(5-fluoro-4-pyrimidinyl)-1-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)-2-butanol
中文名称	A-(2,4-二氟苯基)-5-氟-B-甲基-A-(1,2,4-三唑-1-甲基)-4-嘧啶乙醇
CAS号	137234-63-0
分子式	C ₁₆ H ₁₄ F ₃ N ₅ O
分子量	349.31
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 2-(2,4-二氟苯基)-3-(5-氟-4-嘧啶基)-1-(1H-1,2,4-三唑-1-基)-2-丁醇, 中文别名 A-(2,4-二氟苯基)-5-氟-B-甲基-A-(1,2,4-三唑-1-甲基)-4-嘧啶乙醇, CAS 号为 137234-63-0。其分子式为 C₁₆H₁₄F₃N₅O, 分子量为 349.31, 纯度高于 96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 具有三唑和嘧啶双杂环结构, 氟原子的引入增强了其生物活性与稳定性。

2. 生物化学功能与重要性

本品是一种三唑类衍生物, 通过抑制真菌细胞膜麦角甾醇的生物合成发挥抗真菌作用。其特异性靶向真菌 CYP51 酶 (14 α -去甲基化酶), 干扰细胞膜完整性, 导致真菌生长抑制或死亡。因其对多种致病真菌 (如念珠菌、曲霉菌) 具有高效抑制作用, 在抗真菌药物研发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于医药研发领域, 作为抗真菌药物 (如伏立康唑类似物) 的关键中间体。具体用途包括:

- 新型三唑类抗真菌药物的合成与结构修饰
- 真菌耐药性机制研究中的工具化合物
- 体外抗菌活性筛选实验的阳性对照品

4. 储存条件与使用建议

建议在-20℃干燥避光条件下保存, 长期储存需充惰性气体保护。使用时需在干燥环境中操作, 避免反复冻融。溶解性测试表明, 本品易溶于 DMSO (>10 mg/mL), 微溶于甲醇, 水溶性较差。实验操作需佩戴防护手套及护目镜, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度 \geq 96%, 残留溶剂符合 ICH 标准。MS 和 NMR 谱图确保结构确证。安全数据:

- 危险代码: Xi (刺激性)
- 防范说明: 避免接触眼睛, 操作后彻底清洗
- 急救措施: 如接触眼睛, 立即用大量清水冲洗并就医

本产品仅限科研用途, 不可用于人体或动物治疗。废弃物处置需符合当地环保法规。