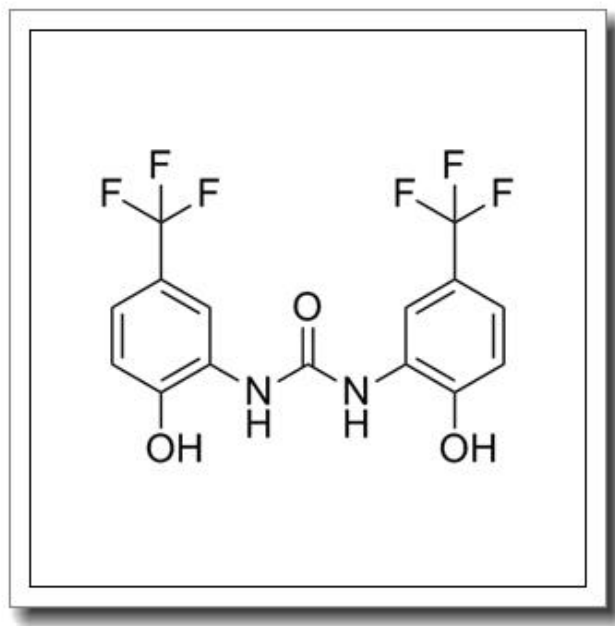


1,3-双(2-羟基-5-(三氟甲基)苯基)脲

1,3-bis[2-hydroxy-5-(trifluoromethyl)phenyl]urea



产品基本信息

属性	值
化学名称	1,3-bis[2-hydroxy-5-(trifluoromethyl)phenyl]urea
中文名称	1,3-双(2-羟基-5-(三氟甲基)苯基)脲
CAS 号	448895-37-2
分子式	C ₁₅ H ₁₀ F ₆ N ₂ O ₃
分子量	380.242
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1,3-双(2-羟基-5-(三氟甲基)苯基)脲 (CAS 号: 448895-37-2) 是一种含三氟甲基的芳香族脲类化合物, 分子式为 $C_{15}H_{10}F_6N_2O_3$, 分子量为 380.242。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在, 纯度通常 $\geq 96\%$ 。其结构中的羟基和三氟甲基赋予其独特的极性和化学稳定性, 使其在有机合成和生物化学领域具有重要价值。该化合物易溶于极性有机溶剂如 DMSO 和 DMF, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为脲类衍生物, 该化合物可通过氢键和疏水相互作用与生物分子 (如蛋白质或核酸) 结合, 表现出潜在的生物活性。三氟甲基的引入增强了其脂溶性和代谢稳定性, 使其在药物化学中成为重要的中间体或活性分子骨架。此外, 羟基的存在使其可能参与金属离子配位或分子间相互作用, 扩展了其在催化或材料科学中的应用潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发和有机合成领域。在药物化学中, 可作为激酶抑制剂或受体调节剂的候选结构单元; 在材料科学中, 可用于设计功能性高分子或超分子组装体。具体用途包括但不限于: 小分子药物先导化合物的优化、生物活性筛选实验的参比物质, 以及作为特殊功能材料的合成砌块。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光保存, 长期储存需置于惰性气体 (如氩气) 环境中以保持稳定性。使用前需恢复至室温并避免反复冻融。操作时应佩戴防护手套和护目镜, 在通风橱中进行称量或溶解。建议使用高纯度有机溶剂 (如 HPLC 级 DMSO) 配制溶液, 并现配现用以避免水解或降解。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 验证纯度 ($\geq 96\%$), 批次间一致性严格控制。安全数据表明, 该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时应避免直接接触。如意外吸入或

摄入，需立即就医并提供 MSDS 信息。废弃物处理需符合当地有机化学品处置法规，禁止直接排放至环境中。