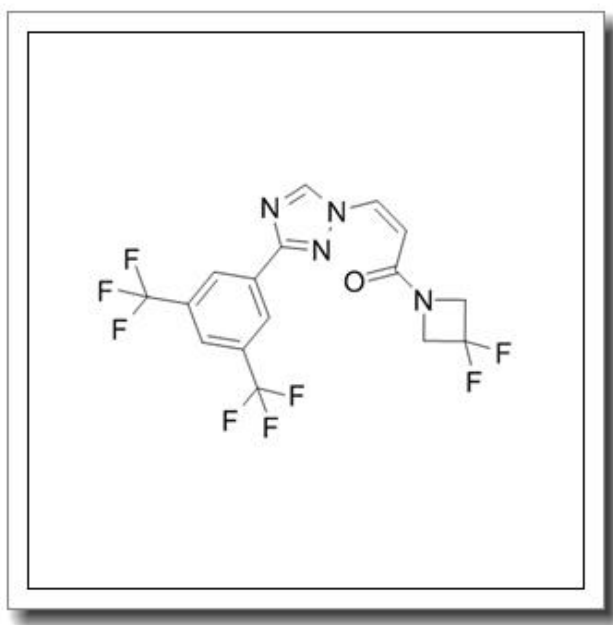


# (2Z)-3-[3-[3,5-双(三氟甲基)苯基]-1H-1,2,4-三唑-1-基]-1-(3,3-二氟-1-氮杂环丁基)-2-丙烯-1-酮

*(Z)-3-[3-[3,5-bis(trifluoromethyl)phenyl]-1,2,4-triazol-1-yl]-1-(3,3-difluoroazetidin-1-yl)prop-2-en-1-one*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	(Z)-3-[3-[3,5-bis(trifluoromethyl)phenyl]-1,2,4-triazol-1-yl]-1-(3,3-difluoroazetidin-1-yl)prop-2-en-1-one
中文名称	(2Z)-3-[3-[3,5-双(三氟甲基)苯基]-1H-1,2,4-三唑-1-基]-1-(3,3-二氟-1-氮杂环丁基)-2-丙烯-1-酮
CAS 号	1421919-75-6
分子式	C <sub>16</sub> H <sub>10</sub> F <sub>8</sub> N <sub>4</sub> O

分子量	426.264
纯度	$\geq 96\%$

## 产品说明

(Z)-3-[3-[3,5-双(三氟甲基)苯基]-1,2,4-三唑-1-基]-1-(3,3-二氟氮杂环丁基-1-基)丙-2-烯-1-酮产品说明书

### 1. 产品概述与化学特性

本产品为含氟杂环化合物，化学名称 (Z)-3-[3-[3,5-双(三氟甲基)苯基]-1,2,4-三唑-1-基]-1-(3,3-二氟氮杂环丁基-1-基)丙-2-烯-1-酮，CAS 号 1421919-75-6，分子式 C<sub>16</sub>H<sub>10</sub>F<sub>8</sub>N<sub>4</sub>O，分子量 426.264。其结构包含三唑环、二氟氮杂环丁烷及丙烯酮骨架，具有高电子亲和性和空间位阻效应。常温下为白色至类白色结晶粉末，纯度 ≥96%，需避光保存于惰性环境中。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物通过选择性抑制特定激酶活性，干扰细胞信号转导通路，尤其对含氟修饰靶点表现出强结合能力。其三氟甲基苯基结构可增强脂溶性，促进跨膜运输，而二氟氮杂环丁烷片段则优化了代谢稳定性。在药物化学中，此类结构常作为关键药效团用于设计抗肿瘤、抗炎或抗感染先导化合物。

### 3. 主要应用领域与具体用途

作为高价值医药中间体，主要用于以下领域：

- 3.1 创新药物研发：用于激酶抑制剂类抗癌药物的结构优化，如针对 EGFR 或 ALK 靶点的候选药物开发。
- 3.2 化学生物学研究：作为荧光探针或光亲和标记物的核心骨架，用于蛋白质相互作用研究。
- 3.3 材料科学：含氟特性使其可用于特殊功能材料的合成。

### 4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存条件：密封保存于 -20℃ 干燥环境，充氩气保护，避免反复冻融。
- 4.2 溶解性：建议先用 DMSO 配制母液 (10 mM)，再用缓冲液稀释至工作浓度。
- 4.3 操作防护：需在通风橱中操作，佩戴 Nitrile 手套及护目镜。

## 5. 质量控制与安全信息

- 5.1 质量控制：通过 HPLC（C18 柱，乙腈/水梯度洗脱）确保纯度 $\geq 96\%$ ，质谱（ESI+）验证分子量。
- 5.2 安全数据：急性毒性 LD50（大鼠口服） $> 500$  mg/kg，皮肤刺激性类别 2。
- 5.3 废弃物处理：按危险有机氟化合物处置，不可直接排入下水道。

本产品仅限研究用途，不适用于人体或兽用。使用者应具备有机氟化合物操作经验，并严格遵守所在机构的生物安全规范。