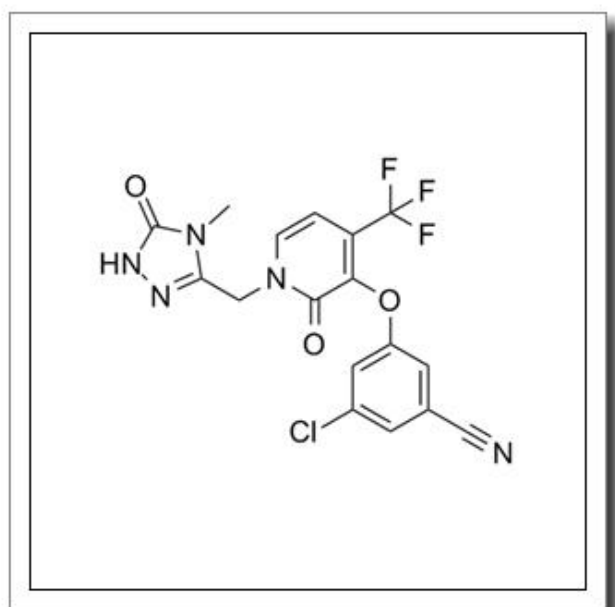


3-氯-5-((1-((4-甲基-5-氧代-4,5-二氢-1H-1,2,4-噻唑-3-基)甲基)-2-氧代-4-(三氟甲基)-1,2-二氢吡啶-3-基)氧基)苯甲腈

3-chloro-5-[1-[(4-methyl-5-oxo-1H-1,2,4-triazol-3-yl)methyl]-2-oxo-4-(trifluoromethyl)pyridin-3-yl]oxybenzotrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-chloro-5-[1-[(4-methyl-5-oxo-1H-1,2,4-triazol-3-yl)methyl]-2-oxo-4-(trifluoromethyl)pyridin-3-yl]oxybenzotrile
中文名称	3-氯-5-((1-((4-甲基-5-氧代-4,5-二氢-1H-1,2,4-噻唑-3-基)甲基)-2-氧代-4-(三氟甲基)-1,2-二氢吡啶-3-基)氧基)苯甲腈

CAS 号	1338225-97-0
分子式	C ₁₇ H ₁₁ ClF ₃ N ₅ O ₃
分子量	425.749
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

3-氯-5-((1-((4-甲基-5-氧代-4,5-二氢-1H-1,2,4-噻唑-3-基)甲基)-2-氧代-4-(三氟甲基)-1,2-二氢吡啶-3-基)氧基)苯甲腈 (CAS 号: 1338225-97-0) 是一种结构复杂的有机化合物, 分子式为 $C_{17}H_{11}ClF_3N_5O_3$, 分子量为 425.749。该化合物以白色至类白色固体形式存在, 纯度不低于 96%。其结构中含有氯代苯甲腈、三氟甲基吡啶酮以及 1,2,4-噻唑酮等活性基团, 赋予其独特的化学性质和生物活性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是一种具有潜在生物活性的小分子, 其结构中的三氟甲基和噻唑酮片段可能参与靶标蛋白的相互作用, 例如抑制特定酶活性或干扰信号通路。其氯代苯甲腈结构也常见于农药和医药中间体, 表明其在生物调控领域具有重要研究价值。

3. 主要应用领域与具体用途

目前, 该化合物主要应用于医药研发和农药化学领域。在医药研究中, 它可能作为先导化合物用于开发抗炎、抗肿瘤或抗感染药物。在农药领域, 其结构特征提示其可能具有杀虫或除草活性, 可用于新型农用化学品的合成与筛选。此外, 它还可作为生化试剂用于相关机制研究或分子探针开发。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于 $-20^{\circ}C$ 、干燥、避光的条件下储存, 以保持其化学稳定性。使用时需在惰性气体 (如氮气) 保护下操作, 避免暴露于潮湿环境或强氧化剂。溶解性测试表明, 该化合物可溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和部分有机溶剂, 但水溶性较差。实验人员应佩戴防护手套和护目镜, 并在通风橱中处理。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过高效液相色谱 (HPLC) 检测, 纯度 $\geq 96\%$ 。使用时需注意其潜在刺激性, 避免吸入粉尘或接触皮肤。如不慎接触, 应立即用大量清水冲洗并就医。安全数据表 (SDS) 提供了详细的毒理学信息和应急处理措施, 使用前务必查阅。废弃物应按照当地法规进行专业处置, 不可随意排放。