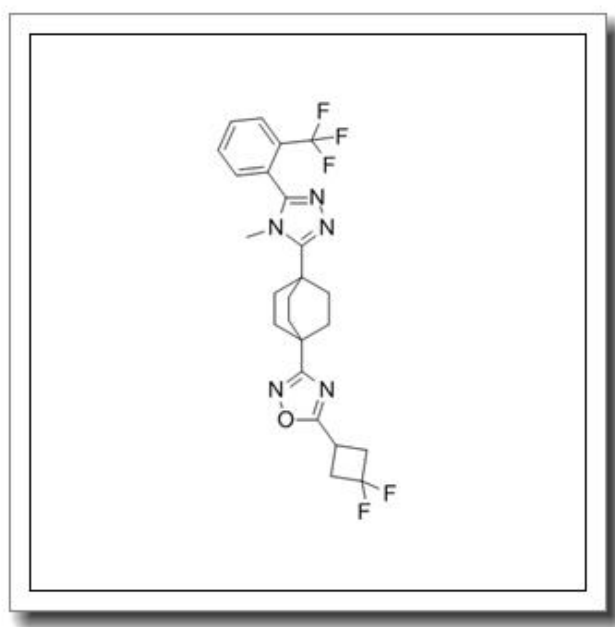


# 5-(3,3-二氟环丁基)-3-[4-[4-甲基-5-[2-(三氟甲基)苯基]-4H-1,2,4-三唑-3-基]双环[2.2.2]辛烷-1-基]-1,2,4-恶二唑

*5-(3,3-Difluorocyclobutyl)-3-(4-{4-methyl-5-[2-(trifluoromethyl)phenyl]-4H-1,2,4-triazol-3-yl}bicyclo[2.2.2]oct-1-yl)-1,2,4-oxadiazole*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	5-(3,3-Difluorocyclobutyl)-3-(4-{4-methyl-5-[2-(trifluoromethyl)phenyl]-4H-1,2,4-triazol-3-yl}bicyclo[2.2.2]oct-1-yl)-1,2,4-oxadiazole
中文名称	5-(3,3-二氟环丁基)-3-[4-[4-甲基-5-[2-(三氟甲基)苯基]-4H-1,2,4-三唑-3-基]双环[2.2.2]辛烷-1-基]-1,2,4-恶二唑
CAS 号	935273-79-3

分子式	C <sub>24</sub> H <sub>24</sub> F <sub>5</sub> N <sub>5</sub> O
分子量	493.472
纯度	≥ 96%

## 产品说明

5-(3,3-二氟环丁基)-3-[4-[4-甲基-5-[2-(三氟甲基)苯基]-4H-1,2,4-三唑-3-基]双环[2.2.2]辛烷-1-基]-1,2,4-恶二唑产品说明书

### 1. 产品概述与化学特性

本产品为高纯度有机氟化合物，化学名称如标题所示，CAS 号为 935273-79-3，分子式 C<sub>24</sub>H<sub>24</sub>F<sub>5</sub>N<sub>5</sub>O，分子量 493.472。其结构包含恶二唑、三唑及双环辛烷骨架，并具有多个氟取代基，赋予其独特的电子效应和疏水性。常温下为白色至类白色固体，纯度 ≥96% (HPLC)，需避光保存。该化合物的稳定性受湿度影响较小，但建议在惰性气氛下操作以避免潜在降解。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为含氟杂环化合物，其结构中的三唑和恶二唑基团可作为氢键受体，与生物靶标（如激酶或 G 蛋白偶联受体）特异性结合。氟原子的引入增强了代谢稳定性和膜穿透性，使其在药物化学中具有重要价值。研究表明，类似结构化合物可能参与调控炎症或肿瘤相关信号通路，但具体机制需进一步验证。

### 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领域：一是作为先导化合物用于优化抗肿瘤或抗炎药物的活性骨架；二是在放射性标记研究中作为示踪剂前体。实验室级用途包括：体外酶活性抑制实验、分子对接模型构建、以及结构-活性关系 (SAR) 研究。禁止直接用于人体或临床治疗。

### 4. 储存条件与使用建议

长期储存需置于 -20°C、干燥惰性气氛（如氩气）保护的密封容器中，短期使用可存放于 2-8°C 干燥器。溶解建议选用无水 DMSO 或乙醇，配制后溶液建议现配现用。操作时需佩戴防渗透手套、护目镜及实验服，避免吸入粉尘或接触皮肤。

### 5. 质量控制与安全信息

批次质检报告包含 HPLC 纯度、水分含量 (KF 法) 及 <sup>1</sup>H NMR 结构验证。急性毒性数据尚未完全建立，但类似结构化合物可能对呼吸道和眼睛有刺激性。泄漏处理需

使用惰性吸附材料收集，废弃物按危险化学品规范处置。MSDS 可应要求提供，运输分类为 UN2811（6.1 类）。

注：本产品仅限科研用途，不适用于食品、化妆品或医疗器械。使用者应具备有机氟化合物操作经验并遵守当地法规。