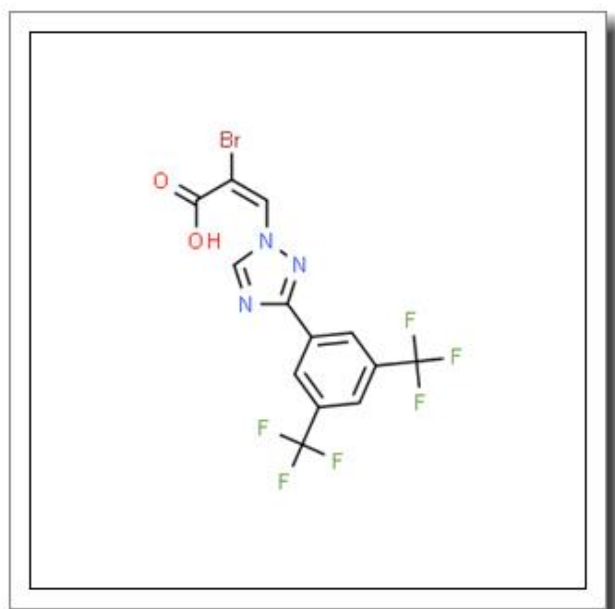


(E)-3-(3-(3,5-双(三氟甲基)苯基)-1H-1,2,4-三唑-1-基)-2-溴丙烯酸

2-Propenoic acid, 3-[3-[3,5-bis(trifluoromethyl)phenyl]-1H-1,2,4-triazol-1-yl]-2-bromo-, (2E)-



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Propenoic acid, 3-[3-[3,5-bis(trifluoromethyl)phenyl]-1H-1,2,4-triazol-1-yl]-2-bromo-, (2E)-
中文名称	(E)-3-(3-(3,5-双(三氟甲基)苯基)-1H-1,2,4-三唑-1-基)-2-溴丙烯酸
CAS 号	1642300-94-4
分子式	C ₁₃ H ₆ BrF ₆ N ₃ O ₂
分子量	430.1000592
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(E)-3-(3-(3,5-双(三氟甲基)苯基)-1H-1,2,4-三唑-1-基)-2-溴丙烯酸 (CAS 号: 1642300-94-4) 是一种含溴和三氟甲基的丙烯酸衍生物, 分子式为 $C_{13}H_6BrF_6N_3O_2$, 分子量为 430.1000592。该化合物具有高纯度 ($\geq 96\%$), 结构中含有三唑环和溴代丙烯酸基团, 赋予其独特的化学活性和稳定性。其(E)-构型在空间排列上具有特定优势, 适用于不对称合成和分子设计。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其三唑环和溴代丙烯酸结构, 在生物化学领域表现出显著的活性。三唑环可作为氢键受体或供体参与分子识别, 而溴代丙烯酸基团则易于发生亲核取代或偶联反应。这些特性使其在酶抑制、药物分子设计和蛋白质修饰中具有潜在应用价值, 尤其适用于开发靶向治疗药物或生物探针。

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, 可作为中间体用于合成抗肿瘤、抗病毒或抗炎活性分子; 在材料科学中, 可用于制备含氟高分子材料或功能性涂层。此外, 其特异性结构也适用于作为荧光标记物或生物共轭试剂的原料。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光保存, 置于干燥、惰性气体环境中以保持稳定性。使用时需在干燥条件下操作, 避免与强氧化剂或还原剂接触。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和部分有机溶剂, 水溶性较低, 建议根据实验需求选择合适的溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格质量控制, 确保纯度 $\geq 96\%$ 。安全信息显示, 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激, 操作时应佩戴防护手套、护目镜并在通风橱中进行。如意外接触, 需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地化学品管理法规。

(注: 以上说明基于现有数据, 具体应用需结合实验验证。)