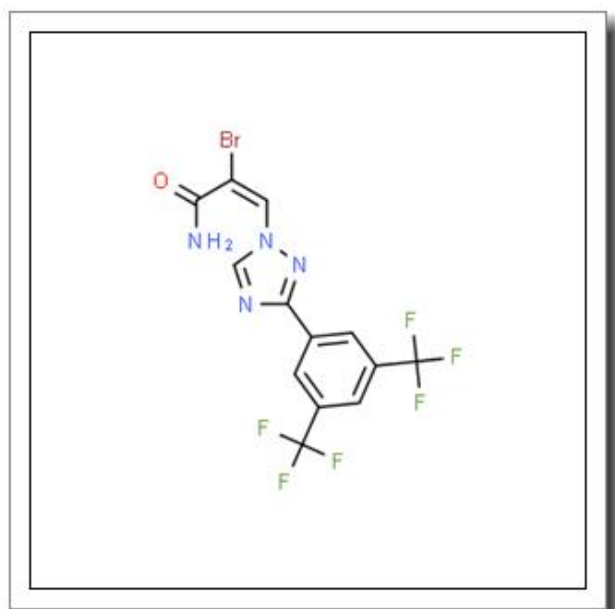


(E)-3-(3-(3,5-双(三氟甲基)苯基)-1H-1,2,4-三唑-1-基)-2-溴代丙烯

2-Propenamide, 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-Propenamide, 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-溴代丙烯
CAS 号	1642300-95-5
分子式	C ₁₃ H ₇ BrF ₆ N ₄ O
分子量	429.12
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为(E)-3-(3-(3,5-双(三氟甲基)苯基)-1H-1,2,4-三唑-1-基)-2-溴代丙烯酰胺,化学式C₁₃H₇BrF₆N₄O,分子量429.12,CAS号1642300-95-5。外观通常为白色至类白色结晶粉末,纯度≥96%。其结构中含有三氟甲基苯基、三唑环及溴代丙烯酰胺基团,赋予其独特的电子效应和空间位阻特性。该化合物在极性有机溶剂(如DMSO、甲醇)中溶解性良好,但在水中溶解度较低,需注意避光保存以防光敏降解。

2. 生物化学功能与重要性

作为含三唑环的溴代丙烯酰胺衍生物,该化合物可通过共价键与生物大分子(如蛋白质巯基)特异性结合,表现出显著的生物活性。其三氟甲基苯基结构可增强脂溶性,促进细胞膜穿透能力,而溴代丙烯酰胺基团则作为亲电试剂参与迈克尔加成反应,在靶标修饰中起关键作用。这类结构常见于激酶抑制剂和信号通路调节剂的开发中,具有潜在药物先导化合物的价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发领域,尤其适用于小分子抗肿瘤药物的设计与合成。其可作为:

- 1) 蛋白激酶抑制剂的中间体,通过三唑环与靶蛋白形成氢键相互作用;
- 2) 放射性标记前体,利用溴原子进行同位素置换;
- 3) 生物共价探针的构建模块,用于蛋白质组学研究。实验室级应用包括体外酶活性测试、细胞水平药效评估等。

4. 储存条件与使用建议

建议长期储存于-20℃、惰性气体(如氩气)保护的密闭容器中,短期使用可存放于2-8℃干燥环境。开封后需充氮密封,避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作,佩戴防护手套及护目镜。溶解推荐使用预冷的无水DMSO,配制后溶液建议分装并于-80℃保存,6个月内使用。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，重金属含量 $< 10\text{ppm}$ ，符合生化试剂标准。安全数据表明其具有刺激性，可能引起皮肤/眼睛灼伤，操作时应避免直接接触。废弃物需按危险化学品处理，不可排入下水道。运输分类为 UN2811 6.1 类毒性物质，需提供 MSDS 随货。如遇泄漏，应立即用惰性吸附材料处理，并用大量清水冲洗污染区域。