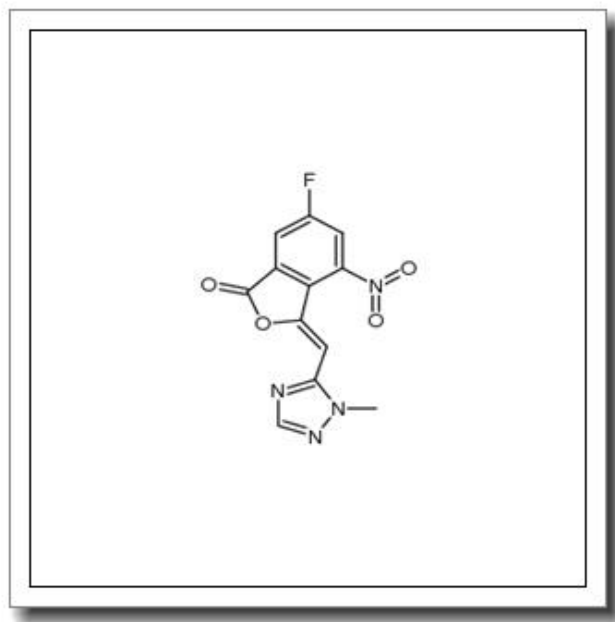


(Z)-6-fluoro-3-((2-methyl-2H-1,2,4-triazol-3-yl)methylene)-4-nitroisobenzofuran-1(3H)-one

(Z)-6-fluoro-3-((2-methyl-2H-1,2,4-triazol-3-yl)methylene)-4-nitroisobenzofuran-1(3H)-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	(Z)-6-fluoro-3-((2-methyl-2H-1,2,4-triazol-3-yl)methylene)-4-nitroisobenzofuran-1(3H)-one
中文名称	(Z)-6-fluoro-3-((2-methyl-2H-1,2,4-triazol-3-yl)methylene)-4-nitroisobenzofuran-1(3H)-one
CAS 号	1322616-34-1
分子式	C ₁₂ H ₇ FN ₄ O ₄
分子量	290.207
纯度	≥96%

产品说明

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为(Z)-6-fluoro-3-((2-methyl-2H-1,2,4-triazol-3-yl)methylene)-4-nitroisobenzofuran-1(3H)-one, 中文名与之相同, CAS 号为 1322616-34-1。其分子式为 C₁₂H₇FN₄O₄, 分子量为 290.207, 纯度 ≥ 96%。该化合物为含氟、硝基及三唑结构的异苯并呋喃酮衍生物, 具有独特的电子效应和空间构型, 在有机合成和药物化学研究中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其含氟和三唑基团, 表现出显著的生物活性潜力, 可能作为酶抑制剂或受体调节剂发挥作用。硝基和氟原子的引入可增强其与生物分子的相互作用, 使其在药物开发中成为重要的中间体或先导化合物。其 Z 构型进一步影响了其与靶标的结合特异性, 为结构-活性关系研究提供了重要工具。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发和有机合成领域, 具体用途包括: 作为含氟杂环化合物的模板用于新药设计; 在抗肿瘤、抗感染或中枢神经系统药物研究中作为关键中间体; 用于探索硝基和氟原子对药物代谢及活性的影响。此外, 也可作为荧光探针或标记物的合成前体。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光干燥储存, 长期保存需充惰性气体保护。使用时需在干燥环境中操作, 避免与强氧化剂或还原剂接触。溶解性测试表明其易溶于 DMSO、DMF 等极性有机溶剂, 水溶性较差, 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

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥ 96%, 并提供 MS 和 NMR 图谱以确保结构确证。安全信息提示: 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性, 操作时需佩戴防护手套、护

目镜及防尘口罩。若不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。

以上信息仅供参考，具体实验方案需结合文献及实际需求调整。