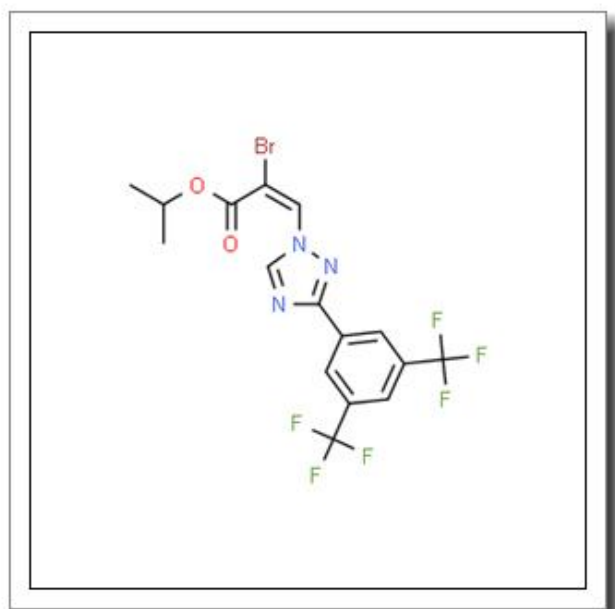


异丙基(E)-3-(3-(3,5-双(三氟甲基)苯基)-1H-1,2,4-三唑-1-基)-2-溴丙烯

2-Propenoic acid, 3-[3-[3,5-bis(trifluoromethyl)phenyl]-1H-1,2,4-triazol-1-yl]-2-bromo-, 1-methylethyl ester, (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-, 1-methylethyl ester, (2E)-
中文名称	异丙基(E)-3-(3-(3,5-双(三氟甲基)苯基)-1H-1,2,4-三唑-1-基)-2-溴丙烯
CAS号	1642300-93-3
分子式	C ₁₆ H ₁₂ BrF ₆ N ₃ O ₂
分子量	472.1797992
纯度	≥ 96%

产品说明

异丙基(E)-3-(3-(3,5-双(三氟甲基)苯基)-1H-1,2,4-三唑-1-基)-2-溴丙烯 (CAS 号: 1642300-93-3) 是一种高纯度有机化合物, 分子式为 C₁₆H₁₂BrF₆N₃O₂, 分子量为 472.18。该化合物为白色至类白色固体, 具有独特的含氟和三唑环结构, 表现出优异的化学稳定性和反应活性。其纯度 ≥96%, 适合用于高要求的生物化学研究及药物开发领域。

1. 产品概述与化学特性

该化合物属于丙烯酸酯类衍生物, 结构中包含三氟甲基苯基和三唑环, 赋予其较强的疏水性和电子效应。溴原子的引入进一步增强了其作为亲电试剂的反应能力。其(E)-构型在特定反应中可提供立体选择性, 适用于不对称合成。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟杂环化合物, 它在药物化学中具有重要价值。三唑环可作为氢键受体或供体参与分子识别, 而三氟甲基苯基能增强脂溶性和代谢稳定性。该结构片段常见于抗真菌、抗病毒及激酶抑制剂类药物的活性分子设计中。

3. 主要应用领域与具体用途

- 医药中间体: 用于合成含三唑结构的靶向药物, 尤其是抗肿瘤和抗感染领域。
- 农药开发: 作为先导化合物优化中的关键砌块, 用于新型杀虫剂和杀菌剂研发。
- 材料科学: 含氟特性使其可用于特殊功能材料的改性。

4. 储存条件与使用建议

- 储存于-20℃至4℃的干燥环境中, 避光密封保存。
- 使用时需在惰性气体(如氮气)保护下操作, 避免潮湿和强氧化剂接触。
- 建议在通风橱中称量, 佩戴防护手套和护目镜。

5. 质量控制与安全信息

- 通过 HPLC 和 NMR 严格检测纯度及结构确证。
- 安全警示: 对眼睛和皮肤有刺激性, 可能引起过敏反应。若不慎接触, 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，避免环境污染。

本产品仅供科研用途，不适用于临床或食品领域。使用前请查阅最新版安全数据表（MSDS）并遵循实验室安全规程。