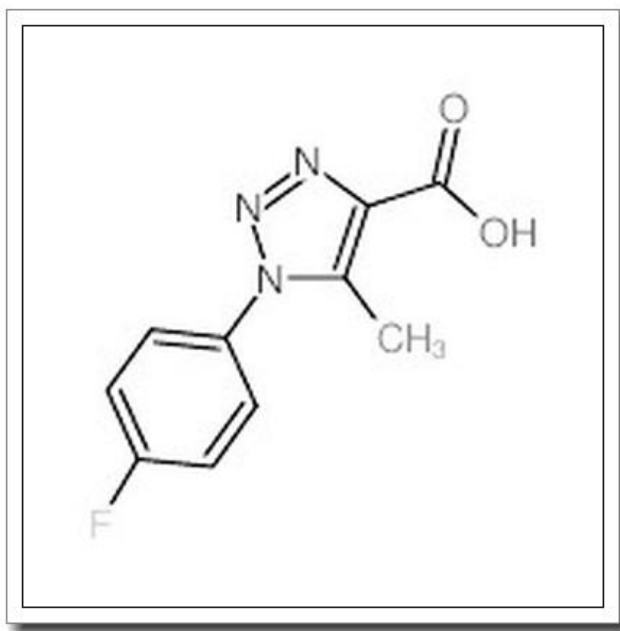


# 1-(4-氟苯基)-5-甲基-1H-1,2,3-噁唑-4-羧酸

*1-(4-fluorophenyl)-5-methyltriazole-4-carboxylic acid*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	1-(4-fluorophenyl)-5-methyltriazole-4-carboxylic acid
中文名称	1-(4-氟苯基)-5-甲基-1H-1,2,3-噁唑-4-羧酸
CAS 号	887035-89-4
分子式	C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> FN <sub>3</sub> O <sub>2</sub>
分子量	221.188
纯度	>96%

## 产品说明

### 1-(4-氟苯基)-5-甲基-1H-1,2,3-噻唑-4-羧酸产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶粉末，化学名称为 1-(4-fluorophenyl)-5-methyltriazole-4-carboxylic acid，分子式 C<sub>10</sub>H<sub>8</sub>FN<sub>3</sub>O<sub>2</sub>，分子量 221.188，CAS 登记号 887035-89-4。其结构中包含氟苯基和羧酸基团，赋予其独特的极性和反应活性。该化合物在常温下稳定，可溶于二甲基亚砷（DMSO）和部分极性有机溶剂，微溶于水。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，符合生化试剂标准。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为含氟杂环化合物，该分子兼具芳香性和羧酸特性，可通过氢键和  $\pi-\pi$  堆积作用与生物靶标结合。其噻唑环结构常见于药物活性分子中，能参与酶抑制或受体调节。氟原子的引入增强了代谢稳定性和细胞膜穿透性，使其在药物研发中具有重要价值，尤其作为激酶抑制剂或抗菌剂的前体化合物。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药中间体合成和生化研究领域。在药物开发中，可用于构建抗肿瘤、抗感染药物的核心骨架；在材料科学中，可作为配体参与金属有机框架（MOF）材料的制备。实验室中常用于研究含氟杂环化合物的构效关系，或作为标准品用于分析方法开发。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20°C 干燥环境中，避免光照和湿度影响。开封后需充入惰性气体保护。使用时需在通风橱中操作，佩戴防护手套和护目镜。溶解推荐使用预冷的 DMSO（浓度 ≤10 mM），溶液现配现用，避免反复冻融。长期储存建议分装后冷冻保存。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱（MS）和核磁共振（NMR）验证结构，HPLC 检测残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明其对眼睛和皮肤有刺激性（GHS 分类 Category 2），操作时需遵

守实验室安全规范。如接触皮肤，立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物应作为有害化学品处置，遵守当地环保法规。

（注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件验证。产品规格可能因批次调整，请以随货质检报告为准。）