

4-三氟甲基噁唑-2-甲酸

4-(Trifluoromethyl)oxazole-2-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-(Trifluoromethyl)oxazole-2-carboxylic acid
中文名称	4-三氟甲基噁唑-2-甲酸
CAS 号	1211580-23-2
分子式	C ₅ H ₂ F ₃ N ₃ O ₃
分子量	181.07
纯度	>96%

产品说明

4-三氟甲基噁唑-2-甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-三氟甲基噁唑-2-甲酸（化学名称：4-(Trifluoromethyl)oxazole-2-carboxylic acid）是一种含氟杂环羧酸化合物，CAS 号为 1211580-23-2，分子式 C₅H₂F₃N₀O₃，分子量 181.07。本品为白色至类白色结晶性粉末，纯度>96%，具有噁唑环与三氟甲基的独特结构，赋予其高反应活性和稳定性。其羧酸基团和杂环结构使其在有机合成中可作为关键中间体。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其三氟甲基的强吸电子效应和噁唑环的刚性结构，在药物化学中常用于修饰分子骨架以增强生物活性。其羧酸基团可进一步衍生化为酯、酰胺等官能团，广泛用于蛋白酶抑制剂、抗菌剂及抗肿瘤药物的研发。三氟甲基的引入可显著改善化合物的脂溶性和代谢稳定性，是新型药物设计的重要砌块。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药领域，本品常用于合成靶向抗病毒药物（如 HCV 蛋白酶抑制剂）和抗炎化合物。在材料科学中，可作为含氟功能材料的单体，用于制备高性能聚合物或液晶材料。此外，在农用化学品研发中，其衍生物可用于开发新型杀虫剂或除草剂。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于-20° C 干燥环境中，避免光照与湿气。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时需在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明，本品易溶于二甲基亚砷（DMSO），微溶于甲醇，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%，重金属含量<10ppm，符合医药研发标准。安全数据表（SDS）显示其具有刺激性，操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。若不

慎接触眼睛，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需遵循当地危险化学品法规，不可直接排放至环境中。

注：本说明仅限科研用途，不适用于诊断或治疗等医疗行为。具体应用需进一步验证其安全性与有效性。