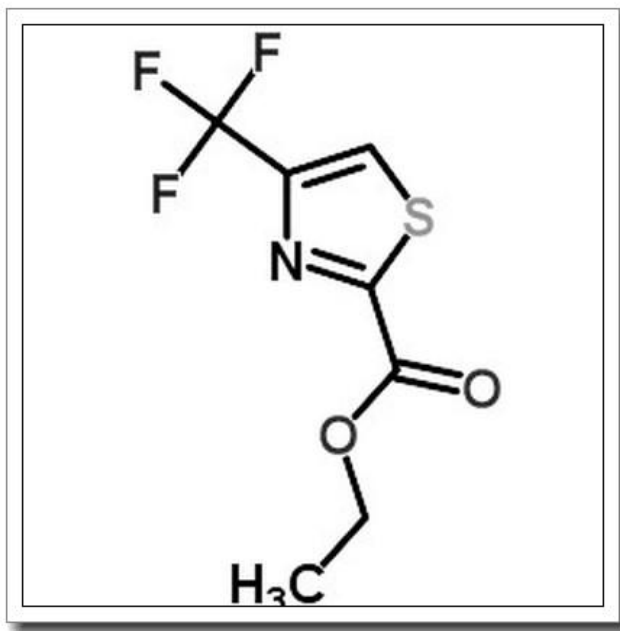


# 4-三氟甲基噻唑-2-甲酸乙酯

*Ethyl 4-(Trifluoromethyl)thiazole-2-carboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 4-(Trifluoromethyl)thiazole-2-carboxylate
中文名称	4-三氟甲基噻唑-2-甲酸乙酯
CAS 号	79247-86-2
分子式	C7H6F3NO2S
分子量	225.188
纯度	>96%

## 产品说明

4-三氟甲基噻唑-2-甲酸乙酯 (Ethyl 4-(Trifluoromethyl)thiazole-2-carboxylate) 是一种重要的含氟杂环化合物, CAS 号为 79247-86-2, 分子式为  $C_7H_6F_3N_2S$ , 分子量为 225.188。本品为无色至淡黄色液体或低熔点固体, 纯度高于 96%, 具有噻唑环和三氟甲基的独特结构, 表现出优异的化学稳定性和反应活性。

### 1. 产品概述与化学特性

该化合物以噻唑环为核心骨架, 2 位羧酸乙酯基团和 4 位三氟甲基的引入显著增强了其电子效应和疏水性。其分子中的硫原子和氮原子可作为配位点, 与金属离子或其他分子相互作用。三氟甲基的强吸电子特性使其在亲核取代反应中具有较高的反应活性, 适用于多种有机合成场景。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为含氟杂环化合物, 4-三氟甲基噻唑-2-甲酸乙酯在药物化学和农药化学中具有重要价值。其结构类似天然噻唑类生物活性分子, 可通过修饰用于设计酶抑制剂或受体拮抗剂。三氟甲基的引入常能改善化合物的代谢稳定性和细胞膜穿透性, 因此在先导化合物优化中备受关注。

### 3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药、农药和材料科学领域。在医药研发中, 它是合成抗感染、抗肿瘤药物的重要中间体; 在农药领域, 可用于制备高效杀虫剂或杀菌剂; 在材料科学中, 可作为功能化单体或表面修饰剂。此外, 它还用于荧光探针和配体设计等研究。

### 4. 储存条件与使用建议

建议在  $-20^{\circ}C$  至  $4^{\circ}C$  下避光密封保存, 长期储存需充惰性气体保护。使用时需在干燥通风环境中操作, 避免与强氧化剂或强酸接触。溶解性测试表明, 本品易溶于有机溶剂 (如 DMSO、乙醇), 难溶于水。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测，纯度>96%，并提供 MS 和 NMR 谱图以确保结构确证。安全信息显示，本品对眼睛和皮肤有刺激性，操作时需佩戴防护手套和护目镜。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，具体实验设计请结合文献与法规要求。