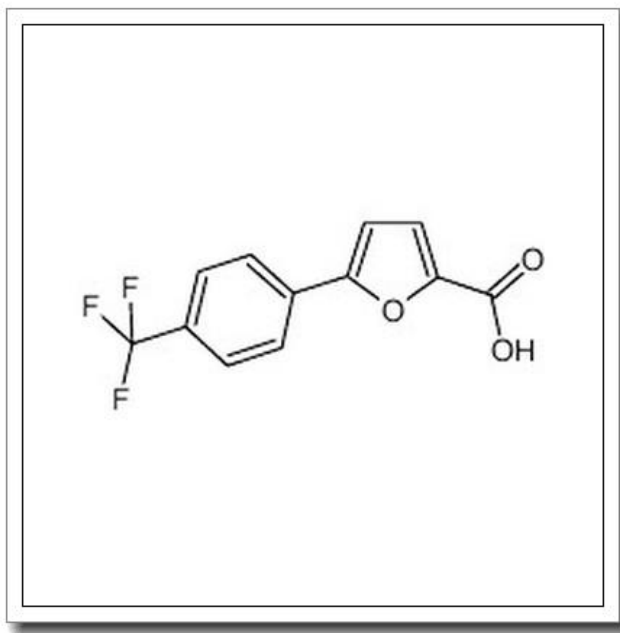


# 5-(4-(三氟甲基)苯基)呋喃-2-羧酸

*5-[4-(trifluoromethyl)phenyl]furan-2-carboxylic acid*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	5-[4-(trifluoromethyl)phenyl]furan-2-carboxylic acid
中文名称	5-(4-(三氟甲基)苯基)呋喃-2-羧酸
CAS 号	55377-78-1
分子式	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> F <sub>3</sub> O <sub>3</sub>
分子量	256.177
纯度	>96%

## 产品说明

### 5-[4-(三氟甲基)苯基]咪喃-2-羧酸产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

5-[4-(三氟甲基)苯基]咪喃-2-羧酸 (CAS 号: 55377-78-1) 是一种含氟芳香族杂环化合物, 分子式为  $C_{12}H_7F_3O_3$ , 分子量 256.177。本品为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 >96%, 具有咪喃环与苯环共轭结构及强吸电子三氟甲基基团, 赋予其独特的化学稳定性和反应活性。其羧酸基团可参与酯化、酰胺化等衍生化反应, 是医药和材料科学领域的重要中间体。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其三氟甲基的强极性及其咪喃环的生物相容性, 在药物设计中常用于增强分子脂溶性和代谢稳定性。其结构特征可模拟天然配体, 干扰酶活性或受体结合, 在抗炎、抗肿瘤靶点研究中具有潜在应用价值。此外, 三氟甲基的引入能显著改变分子的电子分布, 影响其与生物大分子的相互作用机制。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

作为关键合成砌块, 本品广泛应用于以下领域:

医药研发——用于构建小分子抑制剂或激酶调节剂, 尤其在 EGFR、COX-2 等靶点药物开发中;

材料科学——作为液晶材料或有机光电材料的改性单元;

农药化学——合成高效低毒含氟农药的中间体。

#### 4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 避光、防潮, 建议温度 2-8°C 长期保存。使用前需恢复至室温并干燥处理。溶解性测试表明易溶于 DMSO、DMF 等极性有机溶剂, 水溶性较低 (<0.1 mg/mL), 建议先配制高浓度储备液后稀释使用。操作时需在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

#### 5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度 >96%, 批次间保留时间偏差 <0.5%。核磁共振 ( $^1H$  NMR) 与质谱

(MS) 数据备案。

安全警示：本品对眼睛和呼吸道有刺激性，佩戴防护眼镜及 N95 口罩。若接触皮肤，立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物需按危险化学品规范处置。

(注：本说明基于现有研究数据，具体应用需进一步实验验证。产品规格以实际检测报告为准。)