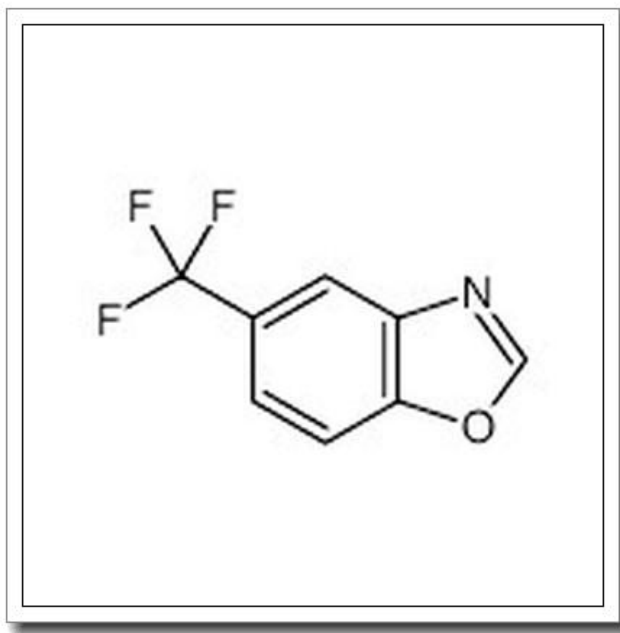


# 5-(三氟甲基)苯并噁唑

*5-(Trifluoromethyl)benzo[d]oxazole*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	5-(Trifluoromethyl)benzo[d]oxazole
中文名称	5-(三氟甲基)苯并噁唑
CAS 号	1267217-46-8
分子式	C <sub>8</sub> H <sub>4</sub> F <sub>3</sub> N <sub>1</sub> O <sub>1</sub>
分子量	187.119
纯度	>96%

## 产品说明

### 5-(三氟甲基)苯并噁唑产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

5-(三氟甲基)苯并噁唑 (化学名称: 5-(Trifluoromethyl)benzo[d]oxazole) 是一种含氟杂环化合物, CAS 号为 1267217-46-8, 分子式为  $C_8H_4F_3NO$ , 分子量为 187.119。该化合物以苯并噁唑为母核, 在 5 位引入三氟甲基基团, 赋予其独特的电子效应和疏水性。其纯度高于 96%, 常温下为白色至类白色结晶或粉末, 可溶于常见有机溶剂如二氯甲烷、乙醇和乙腈, 但不溶于水。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为苯并噁唑类衍生物, 该化合物因其三氟甲基的强吸电子特性, 在分子结构中表现出高稳定性和反应选择性。其杂环结构可作为药效团或中间体参与多种生物活性分子的合成, 尤其在抗肿瘤、抗菌及抗炎药物研发中具有潜在应用价值。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, 是药物化学中常见的结构修饰策略。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药和农药领域的有机合成。在医药研发中, 它是构建激酶抑制剂、G 蛋白偶联受体调节剂等靶向药物的重要中间体。在农药化学中, 可用于合成高效杀虫剂或杀菌剂。此外, 在材料科学中, 可作为荧光探针或液晶材料的合成前体。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在  $-20^{\circ}C$  至  $4^{\circ}C$  的干燥环境中避光保存, 长期储存需充入惰性气体保护。开封后应尽快使用, 避免反复冻融或暴露于潮湿环境。实验操作需在通风橱中进行, 佩戴防护手套和护目镜。溶解时建议使用无水级溶剂以减少水解风险。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确认纯度  $\geq 96\%$ , 批次间质量稳定。安全数据表明, 其可能对眼睛、皮肤及呼吸系统产生刺激, 操作时应避免直接接触。如发生泄漏, 需用惰性

吸附材料处理并按规定处置废弃物。详细毒理学数据请参阅随附的MSDS（材料安全数据表）。

注：本产品仅限科研用途，不可用于人体或食品相关领域。