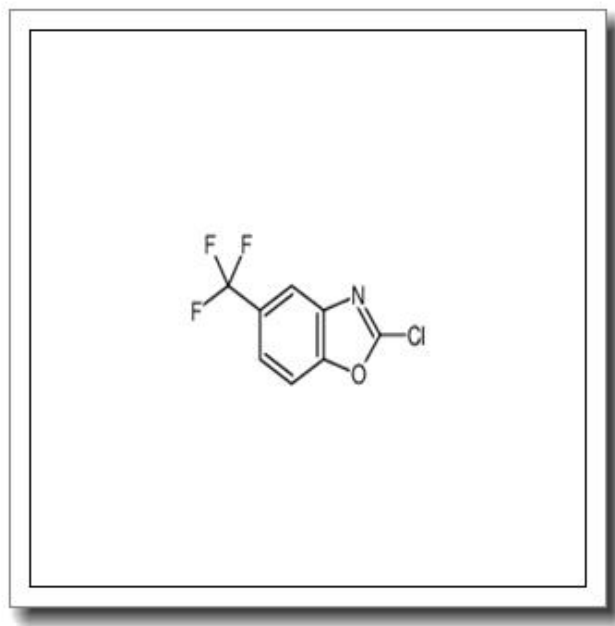


2-氯-5-(三氟甲基)苯并[d]噁唑

2-Chloro-5-(trifluoromethyl)benzo[d]oxazole



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Chloro-5-(trifluoromethyl)benzo[d]oxazole
中文名称	2-氯-5-(三氟甲基)苯并[d]噁唑
CAS 号	114997-91-0
分子式	C ₈ H ₃ ClF ₃ N ₁ O ₁
分子量	221.564
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

2-氯-5-(三氟甲基)苯并[d]噁唑 (CAS 号: 114997-91-0) 是一种含氯和三氟甲基取代的苯并噁唑类化合物, 分子式为 $C_8H_3ClF_3NO$, 分子量为 221.564。该化合物为白色至浅黄色结晶或粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有较高的化学稳定性和反应活性。其结构中苯并噁唑环与强吸电子基团 (三氟甲基和氯) 的结合, 使其在有机合成中表现出独特的电子效应和空间位阻特性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为杂环芳烃衍生物, 在生物化学领域具有潜在的应用价值。其苯并噁唑骨架常见于药物分子和生物活性物质中, 而三氟甲基和氯的引入可显著调节化合物的脂溶性、代谢稳定性和靶标结合能力。此类结构在药物设计中被广泛用于优化先导化合物的药理活性。

3. 主要应用领域与具体用途

2-氯-5-(三氟甲基)苯并[d]噁唑主要应用于医药和农药中间体的合成。在医药领域, 它是构建抗肿瘤、抗病毒及抗炎药物的重要砌块; 在农药化学中, 可用于合成高效杀虫剂和杀菌剂。此外, 该化合物还可作为有机发光材料或配体的前体, 应用于功能材料研究。

4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光、密闭条件下储存, 温度控制在 $2-8^{\circ}C$ 以延长稳定性。使用时需在惰性气体 (如氮气) 保护下操作, 避免与强氧化剂或强酸接触。实验人员应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩, 确保通风良好。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度 $\geq 96\%$, 并提供详细的质检报告 (COA)。其安全信息如下: 可能对眼睛、皮肤和呼吸道产生刺激, 操作时需严格遵守化学品安全规范。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处理标准处置。