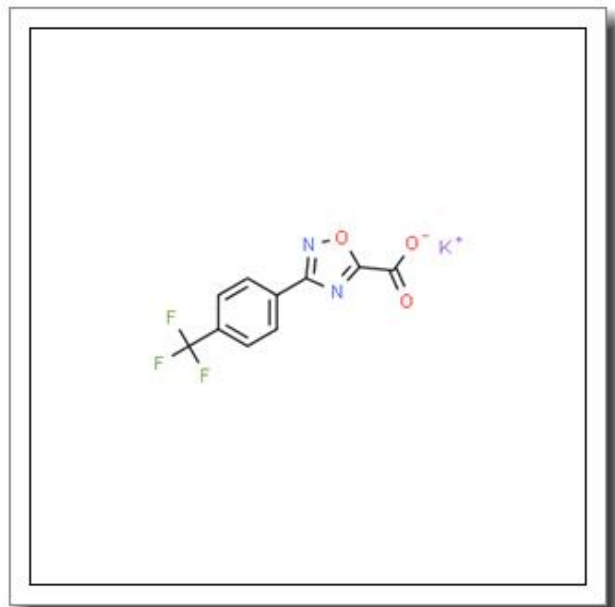


3-(4-(三氟甲基)苯基)-1,2,4-恶二唑-5-羧酸乙酯钾盐

Potassium 3-(4-(trifluoromethyl)phenyl)-1,2,4-oxadiazole-5-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Potassium 3-(4-(trifluoromethyl)phenyl)-1,2,4-oxadiazole-5-carboxylate
中文名称	3-(4-(三氟甲基)苯基)-1,2,4-恶二唑-5-羧酸乙酯钾盐
CAS 号	2007917-47-5
分子式	C10H4F3KN2O3
分子量	296.2438696
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品为 Potassium 3-(4-(trifluoromethyl)phenyl)-1,2,4-oxadiazole-5-carboxylate (中文名: 3-(4-(三氟甲基)苯基)-1,2,4-恶二唑-5-羧酸乙酯钾盐), CAS 号为 2007917-47-5, 分子式为 $C_{10}H_4F_3KN_2O_3$, 分子量为 296.24。该化合物是一种含三氟甲基和恶二唑环的有机钾盐, 纯度 $\geq 96\%$, 具有稳定的化学性质。其结构中恶二唑环与苯环的共轭体系赋予其独特的电子特性, 而三氟甲基的引入增强了疏水性和生物活性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学领域作为关键中间体或功能分子, 其恶二唑环结构可参与氢键形成和 $\pi-\pi$ 堆积相互作用, 常用于药物设计和酶抑制研究。三氟甲基的强吸电子效应可调节分子极性, 影响其与靶标蛋白的结合能力。在抗肿瘤、抗菌及抗炎活性分子的开发中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

作为医药中间体, 广泛用于合成含恶二唑骨架的候选药物, 如激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂。在材料科学中, 可用于制备荧光探针或光电材料。此外, 在农药研发中可作为先导化合物优化杀虫或除草活性。实验室中常用于结构-活性关系 (SAR) 研究, 以探索三氟甲基对分子性能的影响。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 的干燥环境中, 避免光照和潮湿。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时应在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明其易溶于极性有机溶剂 (如 DMSO、DMF), 水溶液需现配现用。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 验证结构。安全数据表明, 该化合物可能对眼睛和呼吸道有刺激性, 操作时需佩戴护目镜、手套及防

护口罩。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照危险化学品规范处置。

以上信息基于现有实验数据，具体应用需结合进一步研究验证。