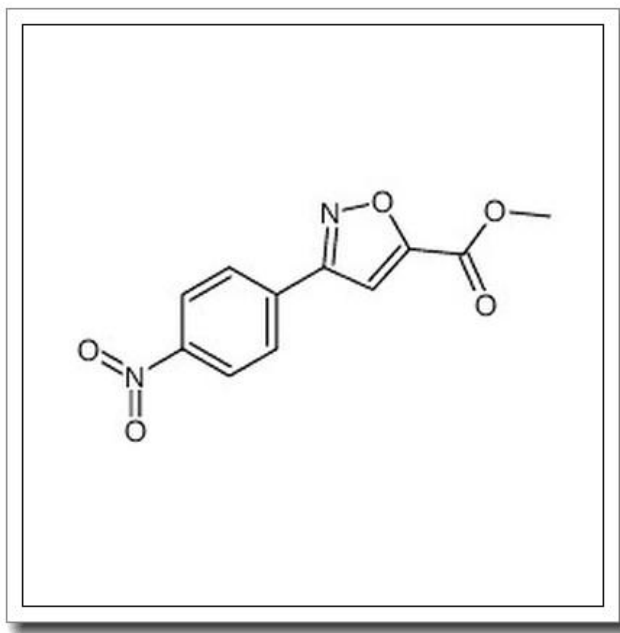


# 3-(4-硝基-苯基)-异噁唑-5-羧酸甲酯

*methyl 3-(4-nitrophenyl)-1,2-oxazole-5-carboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 3-(4-nitrophenyl)-1,2-oxazole-5-carboxylate
中文名称	3-(4-硝基-苯基)-异噁唑-5-羧酸甲酯
CAS 号	487034-01-5
分子式	C <sub>11</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>5</sub>
分子量	248.192
纯度	>96%

## 产品说明

### 3-(4-硝基苯基)-异噁唑-5-羧酸甲酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 methyl 3-(4-nitrophenyl)-1,2-oxazole-5-carboxylate, 中文名为 3-(4-硝基苯基)-异噁唑-5-羧酸甲酯, CAS 号为 487034-01-5。其分子式为 C<sub>11</sub>H<sub>8</sub>N<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, 分子量为 248.192, 纯度高于 96%。该化合物为淡黄色至类白色结晶性粉末, 具有明确的异噁唑环和硝基苯基结构, 在有机溶剂如甲醇、乙醇及二甲基亚砜中具有良好溶解性, 但在水中溶解度较低。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为异噁唑类衍生物, 该化合物因其独特的硝基苯基和酯基结构, 表现出显著的生物活性。其分子中的硝基可作为电子受体, 参与多种亲核取代反应, 而异噁唑环则常见于药物活性分子的核心骨架中。这类结构在抑制酶活性或调控细胞信号通路中具有潜在价值, 尤其在抗炎、抗菌及抗肿瘤领域的先导化合物筛选中备受关注。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药中间体和有机合成领域。在药物研发中, 可作为构建复杂杂环化合物的关键原料, 例如用于合成靶向激酶抑制剂或抗菌剂。此外, 在材料科学中, 其硝基官能团可用于进一步修饰生成荧光探针或高分子单体。实验室中常作为标准品或反应底物, 用于验证新合成方法的可行性。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在-20° C 至 4° C 的干燥环境中避光保存, 长期储存需充入惰性气体保护。开封后应密封防潮, 避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解推荐使用无水 DMF 或 THF, 若用于生物实验, 需通过 HPLC 或 TLC 验证纯度适用性。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, 批次间差异控制在 ±1% 以内。MS 和 NMR 数据可提供验证。安全信息显示, 该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时应避免直接

接触。若不慎吸入或误服，需立即就医并提供 CAS 号。废弃物处理需遵循当地法规，不可直接排放至环境中。

注：以上信息基于现有研究数据，具体应用需进一步实验验证。