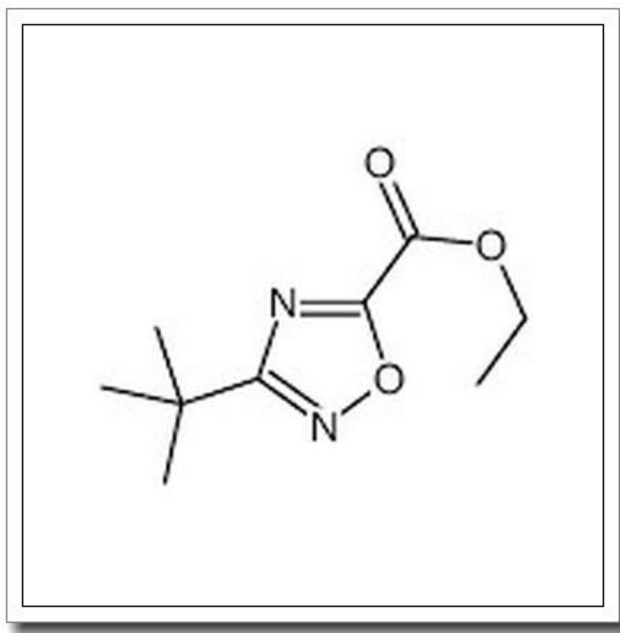


# 3-(叔丁基)-1,2,4-噁二唑-5-羧酸乙酯

*ethyl 3-tert-butyl-1,2,4-oxadiazole-5-carboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 3-tert-butyl-1,2,4-oxadiazole-5-carboxylate
中文名称	3-(叔丁基)-1,2,4-噁二唑-5-羧酸乙酯
CAS 号	163719-73-1
分子式	C <sub>9</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
分子量	198.219
纯度	>96%

## 产品说明

### 3-(叔丁基)-1,2,4-噁二唑-5-羧酸乙酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 ethyl 3-tert-butyl-1,2,4-oxadiazole-5-carboxylate，是一种高纯度有机杂环化合物，CAS 号为 163719-73-1。其分子式为 C<sub>9</sub>H<sub>14</sub>N<sub>2</sub>O<sub>3</sub>，分子量为 198.219，常温下呈无色至淡黄色液体或低熔点固体。结构中包含 1,2,4-噁二唑环和羧酸乙酯基团，叔丁基的引入增强了空间位阻效应，使其在特定反应中表现出优异的稳定性。产品纯度经 HPLC 验证 ≥96%，适用于高精度合成与科研应用。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为 1,2,4-噁二唑类衍生物，具有显著的生物活性潜力。其杂环结构可作为药效团参与药物分子设计，尤其在抗菌、抗炎及神经保护剂研发中受到关注。羧酸乙酯基团提供了进一步修饰的活性位点，使其成为合成中间体的关键模块。在农药化学领域，此类结构对害虫乙酰胆碱酯酶可能表现出抑制活性。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于以下领域：

医药研发中作为先导化合物或中间体，用于构建含氮杂环类药物分子。

农药科学中用于新型杀虫剂或除草剂的结构优化。

材料化学中可作为配体或功能单体，参与金属有机框架（MOF）材料的合成。

实验室级应用包括有机合成方法学研究和杂环化合物库构建。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议储存于 -20° C 至 4° C 的密闭环境中，避光防潮，惰性气体（如氩气）保护可延长稳定性。开封后需立即使用或分装保存。溶解性测试表明易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂，使用时需在通风橱中操作。推荐反应条件避免强酸强碱环境，以防酯基水解或杂环开环。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 GC-MS 和 NMR 双重验证，批次间一致性误差 <2%。安全数据表明其具有刺

激性，操作时需佩戴护目镜、防化手套，接触皮肤后立即用大量清水冲洗。废弃物处理需符合有机卤化物处置规范。运输分类为非危险品，但建议使用防震包装。

注：具体应用前请查阅最新文献或进行小试实验，本说明基于现有研究数据，不排除特定条件下性质变化的可能性。