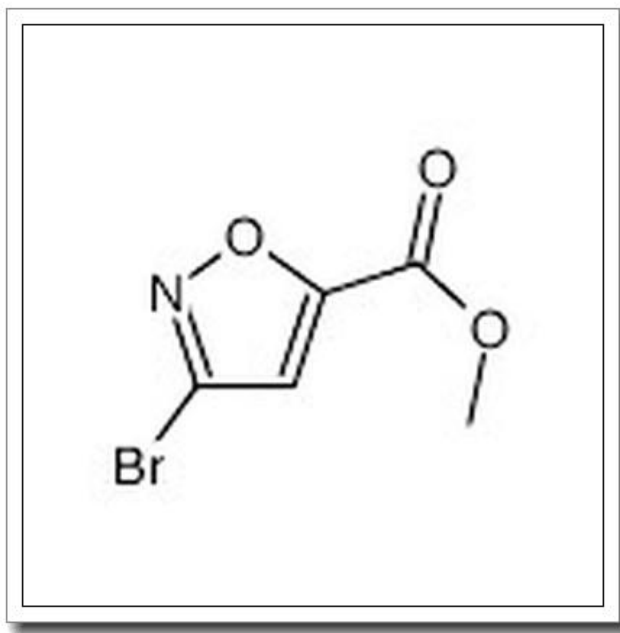


3-溴-5-异噁唑羧酸甲酯

Methyl 3-bromo-1,2-oxazole-5-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 3-bromo-1,2-oxazole-5-carboxylate
中文名称	3-溴-5-异噁唑羧酸甲酯
CAS 号	272773-11-2
分子式	C ₅ H ₄ BrN ₁ O ₃
分子量	205.994
纯度	>96%

产品说明

3-溴-5-异噁唑羧酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-溴-5-异噁唑羧酸甲酯 (Methyl 3-bromo-1,2-oxazole-5-carboxylate) 是一种重要的杂环化合物，化学式为 $C_5H_4BrNO_3$ ，分子量为 205.994，CAS 号为 272773-11-2。该化合物为白色至淡黄色结晶或粉末，纯度高于 96%，具有典型的异噁唑环结构，其 5 位羧酸甲酯基团和 3 位溴原子赋予其独特的反应活性，使其成为有机合成中的关键中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为异噁唑类衍生物，该化合物在药物化学和材料科学中具有广泛的应用潜力。异噁唑环是许多生物活性分子的核心结构，例如抗菌剂、抗炎药和抗肿瘤药物。3 位溴原子的引入进一步增强了其作为亲电试剂的反应性，可用于偶联反应或进一步官能团化，为复杂分子的构建提供灵活选择。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药中间体、农药合成及功能材料开发。在医药领域，它是合成抗生素和抗病毒药物的重要前体；在农药化学中，可用于制备高效低毒的杀虫剂或除草剂；此外，在材料科学中，其衍生物可作为光电材料的构建单元。具体实验用途包括 Suzuki 偶联、亲核取代反应及杂环扩环反应等。

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，长期储存需充惰性气体保护。开封后应尽快使用，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。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂，水溶性较差，建议根据实验需求选择合适的溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测，确保纯度 $>96\%$ 。MSDS 数据显示其为刺激性化合物，接触皮肤或眼睛可能引起炎症，操作时应避免吸入粉尘。废弃物需按危险化学品

品处理规范处置。提供批次专属 COA（质量分析证书），用户可通过 CAS 号或批次编号追溯检测数据。

注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件优化。建议使用者查阅最新文献并开展小试实验以验证适用性。