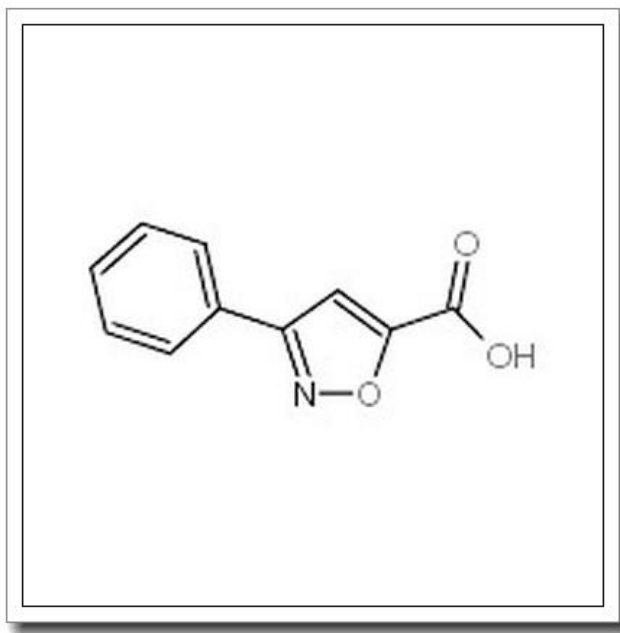


3-苯基异恶唑-5-羧酸

3-Phenylisoxazole-5-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-Phenylisoxazole-5-carboxylic acid
中文名称	3-苯基异恶唑-5-羧酸
CAS 号	14442-12-7
分子式	C ₁₀ H ₇ N ₁ O ₃
分子量	189.167
纯度	>96%

产品说明

3-苯基异恶唑-5-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-苯基异恶唑-5-羧酸 (3-Phenylisoxazole-5-carboxylic acid) 是一种杂环羧酸化合物，化学式为 $C_{10}H_7NO_3$ ，分子量 189.167，CAS 登记号 14442-12-7。本品为白色至类白色结晶性粉末，纯度 >96%，可溶于甲醇、乙醇等有机溶剂，微溶于水。其结构中的异恶唑环和羧酸基团赋予其独特的化学反应性，可作为有机合成中间体或配体使用。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是异恶唑类衍生物的重要代表，其结构核心广泛存在于药物活性分子中。羧酸基团使其易于参与酯化、酰胺化等反应，而苯基与杂环的共轭体系可能影响电子分布，进而调控生物活性。在药物化学领域，此类结构常作为激酶抑制剂或抗菌剂的药效团片段，具有潜在生物活性开发价值。

3. 主要应用领域与具体用途

3-苯基异恶唑-5-羧酸主要用于医药中间体合成，尤其在抗炎、抗肿瘤先导化合物设计中具有应用潜力。具体用途包括：作为有机合成砌块构建杂环药物分子；用于金属配合物催化剂的配体修饰；在材料科学中可作为功能化单体参与聚合物合成。

4. 储存条件与使用建议

建议储存于密闭容器中，置于干燥、避光、 $-20^{\circ}C$ 环境下长期保存。使用前需恢复至室温并避免反复冻融。操作时需佩戴防护手套、护目镜，在通风橱中进行称量与溶解。建议现配现用，剩余溶液需密封保存并于 24 小时内使用。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 >96%，核磁共振 (NMR) 与质谱 (MS) 验证结构。安全数据表明，该物质可能引起眼睛和皮肤刺激，吸入或误食有害。应急处理需参照化学品通用规范：接触皮肤时立即用大量清水冲洗，如吸入需转移至空气新鲜处。废弃物处置应遵守当地环保法规。

(注: 本说明基于现有研究数据, 实际应用需结合具体实验条件进一步验证。)