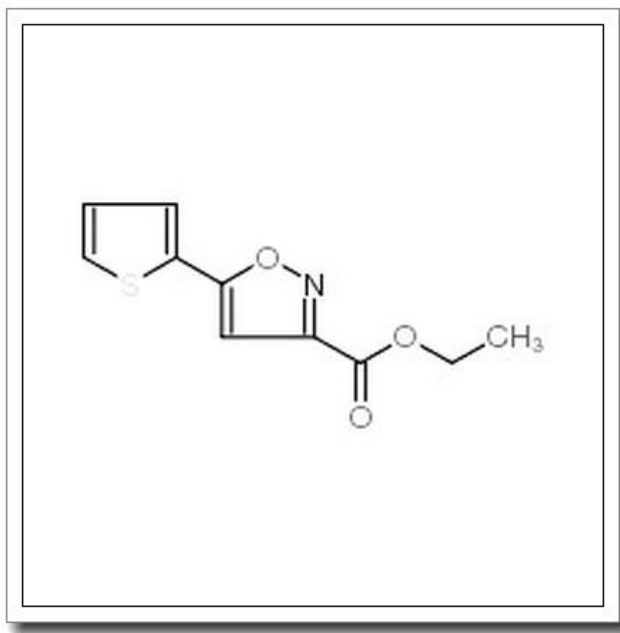


# 5-(2-噻吩基)异噁唑-3-羧酸乙酯

*Ethyl 5-(thiophen-2-yl)isoxazole-3-carboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 5-(thiophen-2-yl)isoxazole-3-carboxylate
中文名称	5-(2-噻吩基)异噁唑-3-羧酸乙酯
CAS 号	90924-54-2
分子式	C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub> S
分子量	223.248
纯度	>96%

## 产品说明

### 5-(2-噻吩基)异噁唑-3-羧酸乙酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

5-(2-噻吩基)异噁唑-3-羧酸乙酯 (Ethyl 5-(thiophen-2-yl)isoxazole-3-carboxylate) 是一种含噻吩和异噁唑环的杂环化合物, CAS 号为 90924-54-2, 分子式为 C<sub>10</sub>H<sub>9</sub>N<sub>0</sub>3S, 分子量 223.248。本品为白色至淡黄色结晶或粉末, 纯度 >96%, 具有独特的芳香杂环结构, 可溶于常见有机溶剂如乙醇、二甲基亚砷 (DMSO) 和乙酸乙酯, 微溶于水。其结构中的酯基和杂环体系赋予其良好的反应活性, 适合作为有机合成中间体。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物是异噁唑类衍生物的重要代表, 异噁唑环作为药效团广泛存在于生物活性分子中, 具有抗菌、抗炎和抗肿瘤等潜在药理活性。噻吩环的引入进一步增强了分子的电子共轭性和生物相容性, 使其在药物设计和材料科学中具有特殊价值。其羧酸乙酯基团可作为前体, 通过水解或氨解反应转化为羧酸或酰胺类衍生物, 拓展应用范围。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发和有机合成领域。在药物化学中, 它是合成抗感染药物、中枢神经系统调节剂及激酶抑制剂的关键中间体。在材料科学中, 可用于制备荧光染料或光电功能材料。此外, 还可作为配体用于金属催化反应, 或用于构建更复杂的杂环体系 (如吡唑、三唑类化合物)。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议密封储存于 -20° C 至 4° C 的干燥环境中, 避免光照和潮湿。开封后需充惰性气体 (如氮气) 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。溶解时建议优先选用无水 DMSO 或乙醇, 配制成溶液后建议短期内使用完毕。

## 5. 质量控制与安全信息

本品通过 HPLC 检测纯度>96%，并提供 COA（质量分析证书）。安全数据表明，该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性，操作时需佩戴防护手套、护目镜及实验服。若不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照国家危险化学品规范处置。运输分类为非易燃固体，但需避免与强氧化剂混储。

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进一步验证。