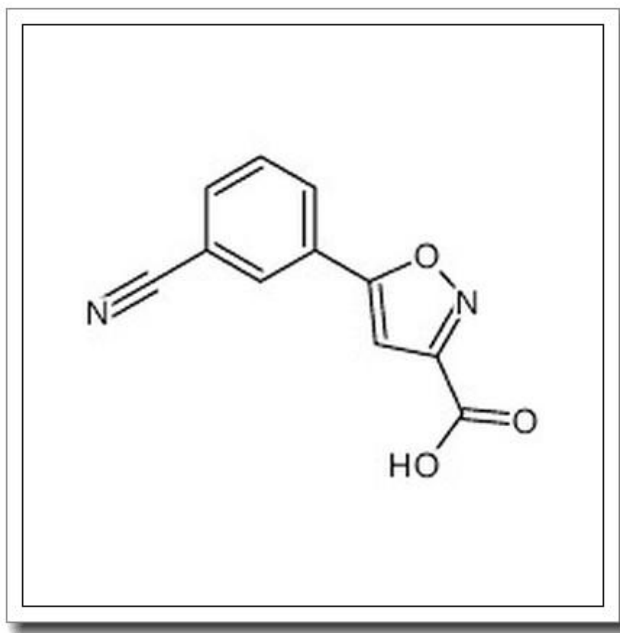


5-(3-氰基苯基)-3-异噁唑羧酸

5-(3-Cyanophenyl)-1,2-oxazole-3-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-(3-Cyanophenyl)-1,2-oxazole-3-carboxylic acid
中文名称	5-(3-氰基苯基)-3-异噁唑羧酸
CAS 号	956360-07-9
分子式	C ₁₁ H ₆ N ₂ O ₃
分子量	214.177
纯度	>96%

产品说明

5-(3-氰基苯基)-3-异噁唑羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-(3-氰基苯基)-3-异噁唑羧酸（化学名称：5-(3-Cyanophenyl)-1,2-oxazole-3-carboxylic acid）是一种具有明确结构的杂环羧酸化合物，CAS 号为 956360-07-9。其分子式为 C₁₁H₆N₂O₃，分子量为 214.177，纯度标准高于 96%。该化合物在常温下为白色至类白色结晶粉末，可溶于极性有机溶剂如二甲基亚砜（DMSO）和甲醇，但在水中溶解度较低。其结构中的氰基和羧基团赋予其独特的反应活性，适用于进一步的衍生化反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为异噁唑类衍生物，该化合物在生物化学领域表现出显著的活性潜力。异噁唑环是多种药物分子和生物活性化合物的核心结构，常见于抗菌、抗炎及抗肿瘤药物的设计中。氰基苯基的引入可增强其与生物靶标的相互作用能力，而羧基团则为其提供了与其他分子偶联或修饰的位点，使其成为药物研发和生化探针合成的重要中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发和有机合成领域。在药物化学中，它可作为构建模块用于合成具有潜在生物活性的异噁唑类化合物，例如激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂。此外，在材料科学中，其刚性结构和功能基团使其可能成为功能材料的组成部分。具体用途包括但不限于：新药筛选的中间体、荧光标记物的前体，以及金属配位化学的研究底物。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品密封保存于干燥、避光的环境中，温度控制在 2-8° C 以延长稳定性。开封后需充入惰性气体（如氮气）保护，避免吸湿或氧化。使用时应佩戴防护手套和护目镜，在通风良好的环境下操作。溶解时优先选用 DMSO 或乙醇，并避免与强氧化剂或还原剂直接接触。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过高效液相色谱（HPLC）检测，纯度 $\geq 96\%$ 。MS 和 NMR 数据可提供进一步的结构确证。安全信息方面，该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统产生刺激，操作时需遵循实验室安全规范（如穿戴防护设备）。若不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地环保法规，不可直接排入下水道。

（注：以上说明基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件进一步验证。）