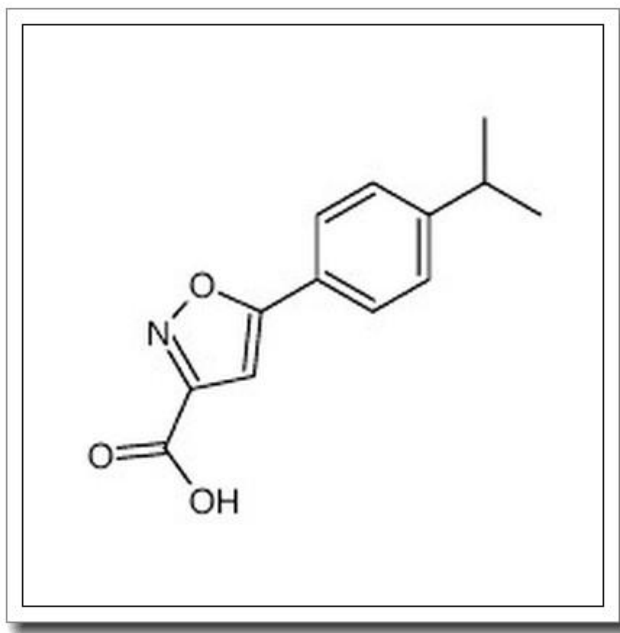


5-[4-(1-甲基乙基)苯基]-3-异噁唑羧酸

5-(4-propan-2-ylphenyl)-1,2-oxazole-3-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-(4-propan-2-ylphenyl)-1,2-oxazole-3-carboxylic acid
中文名称	5-[4-(1-甲基乙基)苯基]-3-异噁唑羧酸
CAS 号	33282-10-9
分子式	C ₁₃ H ₁₃ N ₁ O ₃
分子量	231.247
纯度	>96%

产品说明

5-[4-(1-甲基乙基)苯基]-3-异噁唑羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 5-(4-propan-2-ylphenyl)-1,2-oxazole-3-carboxylic acid, 是一种含异噁唑环的芳香族羧酸衍生物。其分子式为 C₁₃H₁₃N₃O₃, 分子量 231.247, CAS 号为 33282-10-9。该化合物常温下呈白色至类白色结晶粉末, 可溶于二甲基亚砷 (DMSO) 和甲醇等有机溶剂, 微溶于水。纯度经 HPLC 验证 ≥96%, 符合生化试剂标准。

2. 生物化学功能与重要性

作为异噁唑类化合物的代表性物质, 其结构中兼具苯环的疏水性和羧酸基团的反应活性, 可通过氢键或离子相互作用与生物分子结合。异噁唑环作为药效团, 在抑制炎症介质 (如 COX-2) 和调控激酶活性方面具有潜在价值, 是药物先导化合物开发的重要中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于以下领域:

- 3.1 医药研发: 作为非甾体抗炎药 (NSAIDs) 的结构类似物, 用于新型镇痛抗炎药物的分子设计。
- 3.2 材料科学: 作为有机合成砌块, 参与制备液晶材料或光电功能分子。
- 3.3 生化研究: 用于酶活性位点探针开发或蛋白质标记实验。

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存: 密封保存于 -20°C 干燥环境中, 避免光照及湿度 >60%。
- 4.2 稳定性: 常温下可稳定保存 24 个月, 溶液状态建议现配现用。
- 4.3 操作: 建议在通风橱中佩戴防护手套操作, 避免吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

- 5.1 质控标准: 通过 NMR、LC-MS 进行结构确证, 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。
- 5.2 安全数据: 急性毒性 (LD₅₀ 大鼠口服) >2000 mg/kg, 属于低毒类物质。

5.3 应急处理：接触皮肤时立即用肥皂水冲洗，眼部接触需用生理盐水冲洗 15 分钟。

本产品仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。具体实验方案建议参考文献方法或咨询专业技术支持。