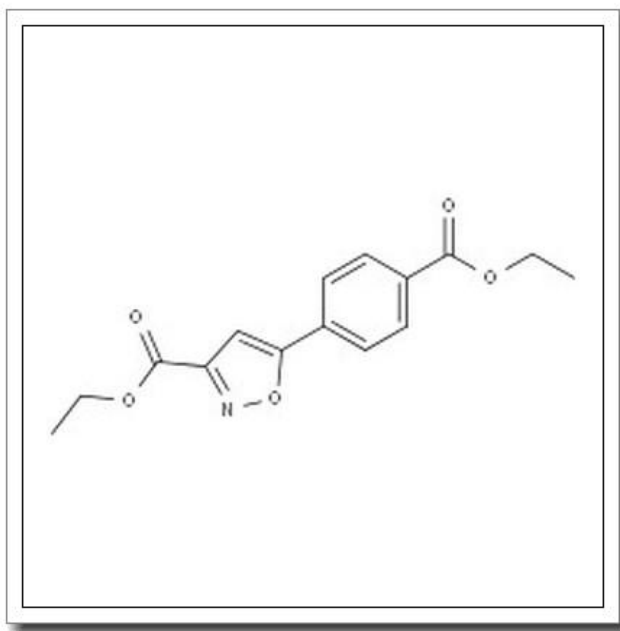


5-[4-(乙氧羰基)苯基]异噁唑-3-甲酸乙酯

Ethyl 5-[4-(Ethoxycarbonyl)phenyl]isoxazole-3-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 5-[4-(Ethoxycarbonyl)phenyl]isoxazole-3-carboxylate
中文名称	5-[4-(乙氧羰基)苯基]异噁唑-3-甲酸乙酯
CAS 号	1820686-51-8
分子式	C ₁₅ H ₁₅ N ₁ O ₅
分子量	289.283
纯度	>96%

产品说明

5-[4-(乙氧羰基)苯基]异噁唑-3-甲酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 Ethyl 5-[4-(Ethoxycarbonyl)phenyl]isoxazole-3-carboxylate，分子式 C₁₅H₁₅N₀O₅，分子量 289.283，CAS 登记号 1820686-51-8。其结构中包含异噁唑环与苯环的双功能团，末端乙氧羰基赋予其良好的脂溶性和反应活性。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

该化合物作为异噁唑类衍生物，具有显著的生物活性基团。其分子中的酯键可水解为羧酸，进一步参与偶联反应；异噁唑环则能作为药效团，在药物设计中用于构建抗菌、抗炎或激酶抑制剂的先导化合物。在信号通路研究中，可作为小分子探针干扰蛋白质相互作用。

3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药研发：用于合成新型异噁唑类抗感染或抗肿瘤候选药物。
- 3.2 材料科学：作为有机发光材料 (OLED) 的前体，修饰后可调节光电性能。
- 3.3 农药开发：衍生化为高效低毒杀虫剂的中间体。
- 3.4 学术研究：用于杂环化合物合成方法学及构效关系研究。

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存：密封避光保存于 -20℃ 干燥环境，惰性气体保护可延长稳定性。
- 4.2 溶解性：推荐使用 DMSO 或二氯甲烷溶解，工作浓度需通过预实验确定。
- 4.3 操作：建议在通风橱中佩戴防护手套，避免吸入粉尘或接触皮肤。

5. 质量控制与安全信息

- 5.1 质检标准：通过核磁共振 (1H NMR)、质谱 (MS) 及 HPLC 三重验证。
- 5.2 安全数据：属于刺激性化学品，皮肤接触后需立即用肥皂水冲洗。
- 5.3 废弃物处理：按危险有机废物处置，不可直接排入下水道。

本产品仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。具体实验方案请参阅最新文献或咨询专业技术支持。