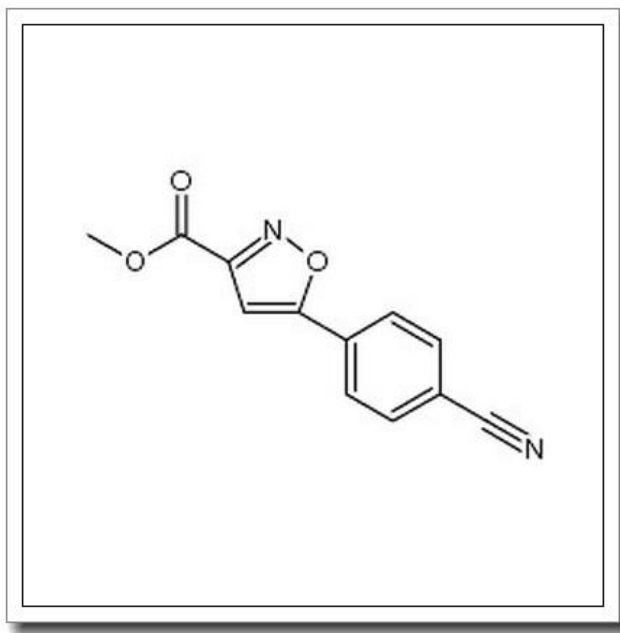


5-(4-氰基苯基)异噁唑-3-甲酸甲酯

3- Isoxazolecarboxylic acid, 5- (4- cyanophenyl) - , methyl ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	3- Isoxazolecarboxylic acid, 5- (4- cyanophenyl) - , methyl ester
中文名称	5-(4-氰基苯基)异噁唑-3-甲酸甲酯
CAS 号	1375064-41-7
分子式	C12H8N2O3
分子量	228.204
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

5-(4-氰基苯基)异噁唑-3-甲酸甲酯 (CAS 号: 1375064-41-7) 是一种有机化合物, 分子式为 $C_{12}H_8N_2O_3$, 分子量为 228.204。该化合物属于异噁唑类衍生物, 结构中包含氰基苯基和甲酯基团, 具有较高的化学稳定性和反应活性。其纯度标准为 $>96\%$, 外观通常为白色至类白色结晶或粉末, 可溶于常见有机溶剂如甲醇、乙醇和二甲基亚砜 (DMSO), 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学研究中具有潜在的应用价值, 其异噁唑环和氰基苯基结构使其可能作为酶抑制剂或信号分子参与生物调控。异噁唑类化合物在药物研发中常用于构建药效团, 因其能够模拟生物体内天然配体的结构特征, 从而干扰特定生物通路或靶点。

3. 主要应用领域与具体用途

5-(4-氰基苯基)异噁唑-3-甲酸甲酯主要用于医药中间体和有机合成领域。在药物研发中, 它可作为构建更复杂分子的关键砌块, 用于合成具有抗菌、抗炎或抗肿瘤活性的化合物。此外, 该产品也可用于材料科学, 作为功能化聚合物的单体或改性剂。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于干燥、阴凉的环境中, 避免光照和潮湿。储存温度应控制在 $2-8^{\circ}C$, 长期保存需密封于惰性气体 (如氮气) 保护下。使用时需佩戴防护手套和护目镜, 并在通风良好的条件下操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过高效液相色谱 (HPLC) 和核磁共振 (NMR) 进行质量控制, 确保纯度 $>96\%$ 。安全信息方面, 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性, 操作时应遵循实验室安全规范。如不慎接触, 应立即用大量清水冲洗, 并寻求医疗帮助。废弃物需按照当地法规进行专业处理。