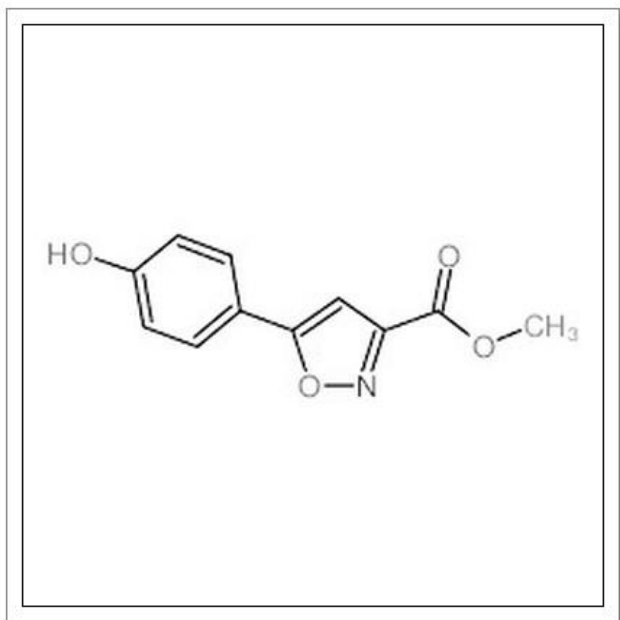


5-(4-羟基苯基)-3-异噁唑羧酸甲酯

Methyl 5-(4-hydroxyphenyl)isoxazole-3-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 5-(4-hydroxyphenyl)isoxazole-3-carboxylate
中文名称	5-(4-羟基苯基)-3-异噁唑羧酸甲酯
CAS 号	60640-71-3
分子式	C ₁₁ H ₉ N ₁ O ₄
分子量	219.193
纯度	>96%

产品说明

5-(4-羟基苯基)-3-异噁唑羧酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 Methyl 5-(4-hydroxyphenyl)isoxazole-3-carboxylate, 中文名为 5-(4-羟基苯基)-3-异噁唑羧酸甲酯, CAS 号为 60640-71-3。其分子式为 C₁₁H₉N₂O₄, 分子量为 219.193, 纯度高于 96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 常温下稳定, 微溶于水, 易溶于有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO。其结构中的异噁唑环和羟基苯基赋予其独特的化学反应活性, 适合作为有机合成中间体或生物活性分子修饰的起始原料。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物属于异噁唑类衍生物, 具有显著的生物活性潜力。异噁唑环是多种药物分子的核心结构, 常见于抗菌、抗炎和抗肿瘤活性分子中。羟基苯基的存在进一步增强了其与生物靶点的相互作用能力, 例如可能参与氢键形成或酶抑制。该分子在药物研发中常用于构建更复杂的杂环体系, 或作为探针研究蛋白质-小分子相互作用机制。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药化学领域, 本品主要用于新型异噁唑类药物的合成, 如 COX-2 抑制剂或激酶抑制剂的中间体。在材料科学中, 可作为光敏材料的改性组分。研究用途包括:

- 作为荧光标记物的前体
- 用于构建抗菌候选化合物的核心骨架
- 在金属有机框架 (MOF) 材料中作为配体修饰剂

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C、避光、干燥条件下长期储存, 短期使用可存放于 2-8° C 环境。开封后需充氮气密封保存, 避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作, 推荐以 DMSO 配制母液 (浓度 ≤ 10mM), 现配现用。水溶液体系需注意 pH 稳定性 (建议 pH 6-8)。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，残留溶剂符合 USP 标准。MS 和 NMR 谱图可随 COA 提供。安全数据：

- GHS 分类：皮肤刺激 (Category 2)
- 防护措施：佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套
- 应急处理：接触皮肤时立即用大量清水冲洗 15 分钟
- 废弃物处置：按危险化学品规范处理

注：本产品仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。具体应用前请查阅最新文献确认兼容性。