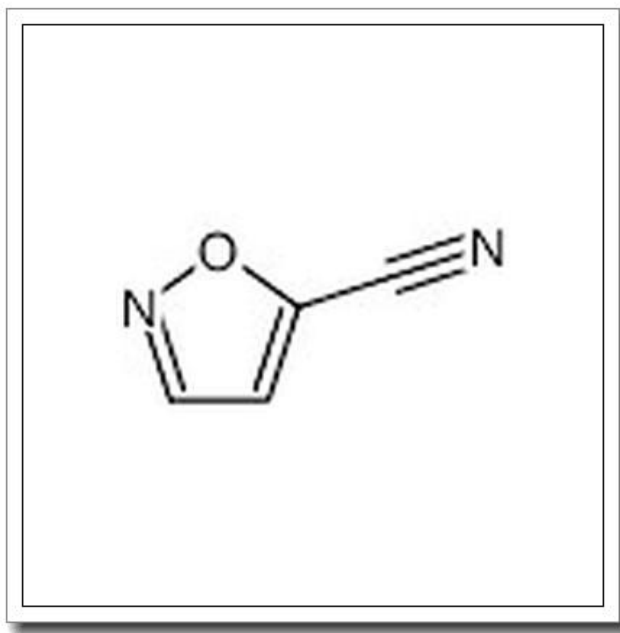


5-氰基异噁唑

1,2-oxazole-5-carbonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	1,2-oxazole-5-carbonitrile
中文名称	5-氰基异噁唑
CAS 号	68776-59-0
分子式	C ₄ H ₂ N ₂ O
分子量	94.0715
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1,2-oxazole-5-carbonitrile (5-氰基异噁唑) 是一种杂环有机化合物, 化学式为 $C_4H_2N_2O$, 分子量为 94.0715, CAS 号为 68776-59-0。该化合物为白色至淡黄色结晶粉末, 纯度高于 96%, 具有典型的氰基和异噁唑环结构。其熔点和沸点数据需参考具体实验条件, 易溶于极性有机溶剂如甲醇、乙腈, 微溶于水。异噁唑环的电子离域特性使其在化学反应中表现出较高的活性, 尤其是 5 位氰基的引入增强了其作为中间体的应用潜力。

2. 生物化学功能与重要性

5-氰基异噁唑是合成多种生物活性分子的关键砌块, 其异噁唑环结构广泛存在于药物和农药中。氰基的强吸电子效应可调节分子整体的电子分布, 影响与生物靶标的相互作用。该化合物在抑制酶活性或干扰信号通路方面具有潜在价值, 尤其在抗炎、抗菌及抗肿瘤先导化合物的开发中备受关注。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药领域, 该产品常用于构建抗病毒药物 (如流感抑制剂) 和激酶抑制剂的杂环核心。农业化学中, 其衍生物可作为除草剂或杀虫剂的活性成分。此外, 在材料科学中, 5-氰基异噁唑可作为荧光探针或高分子单体的前体。具体实验用途包括: 有机合成中的环加成反应、亲核取代反应的底物, 以及金属催化偶联反应的配体修饰。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、避光、干燥的惰性气体 (如氮气) 环境下长期储存, 短期使用可置于 $4^{\circ}C$ 密封容器中。开封后需避免吸湿, 建议分装使用。操作时需在通风橱中进行, 佩戴防尘口罩、护目镜及丁腈手套。溶解性测试推荐使用干燥 DMSO 或 DMF, 水溶液需现配现用以防水解。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。MSDS 显示其 LD50

（大鼠口服）为 320 mg/kg，属于有害物质（H302）。避免吸入粉尘或接触皮肤，如意外接触需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理应遵循当地法规，建议采用焚烧法。运输分类为 UN2811（6.1 类），需贴有毒化学品标签。