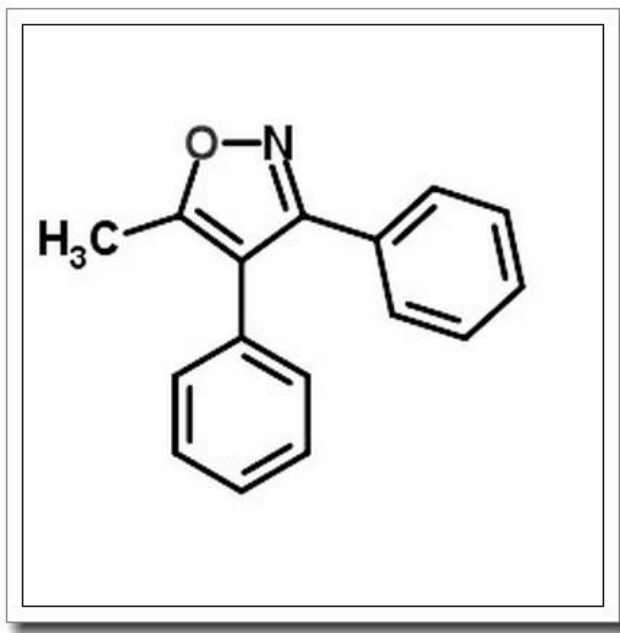


# 5-甲基-3,4-二苯基-异噁唑

*5-Methyl-3,4-diphenylisoxazole*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	5-Methyl-3,4-diphenylisoxazole
中文名称	5-甲基-3,4-二苯基-异噁唑
CAS 号	37928-17-9
分子式	C <sub>16</sub> H <sub>13</sub> NO
分子量	235.281
纯度	>96%

## 产品说明

### 5-甲基-3,4-二苯基-异噁唑产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

5-甲基-3,4-二苯基-异噁唑 (5-Methyl-3,4-diphenylisoxazole, CAS 号 37928-17-9) 是一种含氮杂环化合物, 分子式为  $C_{16}H_{13}NO$ , 分子量 235.281。该化合物以异噁唑环为核心结构, 在 3 位和 4 位分别连接苯基取代基, 5 位带有甲基基团, 形成稳定的芳香杂环体系。其纯度高于 96%, 常温下为白色至类白色结晶粉末, 具有典型的芳烃特征性溶解性 (易溶于有机溶剂如乙醇、二氯甲烷, 难溶于水)。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为异噁唑类衍生物, 该化合物可通过杂环上的氮氧原子参与氢键形成和分子间相互作用, 在药物化学中常作为药效团或中间体。其结构特征使其具有潜在的生物活性, 例如抑制炎症相关酶或作为激酶抑制剂的结构模块。在材料科学领域, 苯基修饰的异噁唑结构可赋予材料特殊的光电性能。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

3.1 医药研发: 用于构建抗肿瘤、抗感染或中枢神经系统药物的核心骨架, 尤其在小分子靶向药物设计中广泛应用。

3.2 有机合成: 作为关键中间体参与环加成、偶联等反应, 例如合成多取代吡啶或功能化异噁唑衍生物。

3.3 材料科学: 可作为液晶材料或有机发光二极管 (OLED) 的电子传输层组分。

#### 4. 储存条件与使用建议

4.1 储存条件: 需密封保存于干燥、避光环境中, 推荐温度 2-8°C, 长期储存建议充惰性气体保护。

4.2 使用建议: 实验操作应在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解时优先选用 DMF、THF 等极性溶剂, 必要时可加热至 60°C 促进溶解。

#### 5. 质量控制与安全信息

5.1 质量控制: 通过 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ , 批次间保留时间偏差  $\leq 0.5\%$ , 水分含量

≤0.2%。

5.2 安全信息：根据 GHS 分类，该产品可能引起眼睛刺激（H319）和皮肤刺激（H315），操作时应佩戴护目镜和丁腈手套。若不慎接触，立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物处理需符合当地危险化学品管理条例。

注：本产品仅限科研用途，不可用于临床或食品领域。具体应用前请查阅最新文献数据并开展小试实验验证。