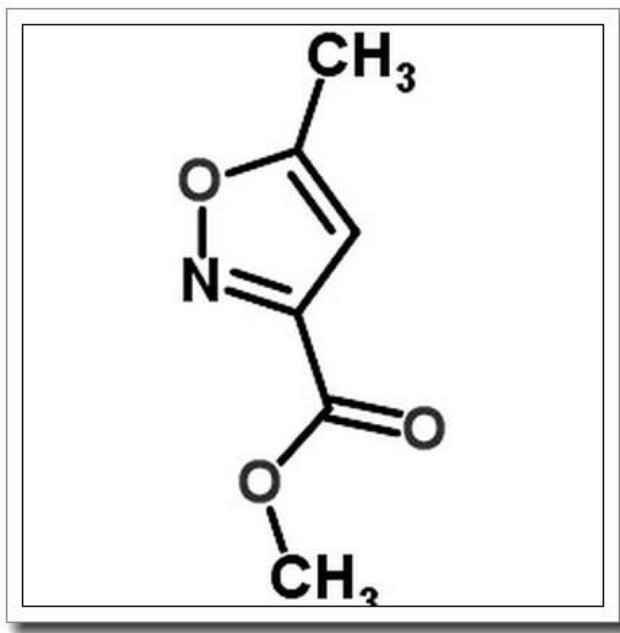


# 5-甲基异恶唑-3-羧酸甲酯

*methyl 5-methyl-1,2-oxazole-3-carboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 5-methyl-1,2-oxazole-3-carboxylate
中文名称	5-甲基异恶唑-3-羧酸甲酯
CAS 号	19788-35-3
分子式	C6H7NO3
分子量	141.125
纯度	>96%

## 产品说明

### 5-甲基异恶唑-3-羧酸甲酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

5-甲基异恶唑-3-羧酸甲酯 (methyl 5-methyl-1,2-oxazole-3-carboxylate) 是一种杂环羧酸酯类化合物, 化学式为  $C_6H_7NO_3$ , 分子量 141.125, CAS 号为 19788-35-3。本品为无色至淡黄色液体或低熔点固体, 具有特征性气味, 纯度  $\geq 96\%$ 。其结构中包含异恶唑环和甲酯基团, 赋予其良好的反应活性, 可作为有机合成中间体或生物活性分子的构建模块。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学领域具有显著价值, 其异恶唑环结构常见于多种药物分子和天然产物中。作为羧酸酯衍生物, 它可通过水解、缩合等反应进一步修饰, 用于合成抗生素、抗炎药或农药活性成分。其甲基和甲酯基团的引入可调节脂溶性和生物利用度, 在药物设计中常用于优化先导化合物的理化性质。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发中, 本品用于构建  $\beta$ -内酰胺类抗生素的侧链或作为激酶抑制剂的合成前体。农业化学领域则应用于新型杀虫剂或除草剂的开发。此外, 在材料科学中可作为配体或功能单体参与高分子材料的合成。实验室常用作有机合成反应的中间体, 尤其适用于杂环化合物的结构修饰。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在  $-20^{\circ}C$  至  $4^{\circ}C$  条件下避光保存, 置于干燥惰性气体 (如氮气) 环境中。开封后需密封保存, 避免与湿气或强氧化剂接触。使用时应佩戴防护手套、护目镜, 并在通风橱中操作。溶解性测试表明易溶于甲醇、乙醚等有机溶剂, 水溶性较低, 配制溶液时需选择适当溶剂。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ , 批次间差异控制在  $\pm 1\%$  以内。MS 和 NMR 谱图确保结构准确性。安全数据表明, 该物质对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时需避免直接

接触。如发生泄漏，应用惰性吸附材料处理。废弃物应按照危险化学品处置规范处理，不得直接排入下水道。

注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件进一步验证。建议使用者查阅最新版 MSDS 并遵守当地法规要求。