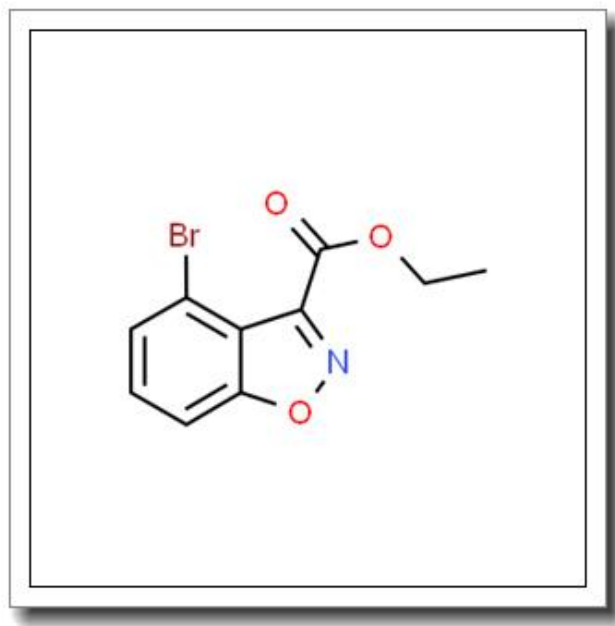


4-溴苯并[D]异恶唑-3-羧酸乙酯

Ethyl 4-bromobenzo[d]isoxazole-3-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 4-bromobenzo[d]isoxazole-3-carboxylate
中文名称	4-溴苯并[D]异恶唑-3-羧酸乙酯
CAS 号	1352398-39-0
分子式	C ₁₀ H ₈ BrNO ₃
分子量	270.08
纯度	≥96%

产品说明

4-溴苯并[D]异恶唑-3-羧酸乙酯产品说明

1. 产品概述与化学特性

4-溴苯并[D]异恶唑-3-羧酸乙酯 (Ethyl 4-bromobenzo[d]isoxazole-3-carboxylate) 是一种有机溴化合物, CAS 号为 1352398-39-0, 分子式为 $C_{10}H_8BrN_2O_3$, 分子量为 270.08。本品为白色至类白色结晶或粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有异恶唑环和羧酸酯基团的结构特征, 表现出良好的化学稳定性和反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为苯并异恶唑类衍生物, 在药物化学和有机合成中具有重要价值。其结构中的溴原子可作为活性位点参与偶联反应 (如 Suzuki 偶联), 而羧酸酯基团可通过水解或氨解转化为其他功能基团。这类结构常见于抗菌、抗炎及中枢神经系统药物的先导化合物设计中。

3. 主要应用领域与具体用途

- 医药中间体: 用于合成具有生物活性的杂环化合物, 如靶向抗癌或抗感染药物。
- 材料科学: 作为有机光电材料的合成前体, 参与构建 π 共轭体系。
- 科研试剂: 在有机方法学研究中用于开发新型催化反应或官能团转化策略。

4. 储存条件与使用建议

- 储存于密封容器中, 避光、干燥, 温度控制在 $2-8^{\circ}C$ (长期储存建议 $-20^{\circ}C$)。
- 使用时需在惰性气体 (如氮气) 保护下操作, 避免接触强氧化剂或酸碱环境。
- 溶解性测试表明易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、二氯甲烷等有机溶剂, 水溶性低。

5. 质量控制与安全信息

- 质量控制: 通过 HPLC 检测纯度, 核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 验证结构。
- 安全警示: 对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时需佩戴防护手套、护目镜及实验服。
- 应急处理: 若接触皮肤, 立即用大量清水冲洗; 吸入粉尘时转移至通风处。

本产品仅限科研用途, 不适用于医药或食品领域。详细信息请参阅随附的安全数据表 (SDS)。