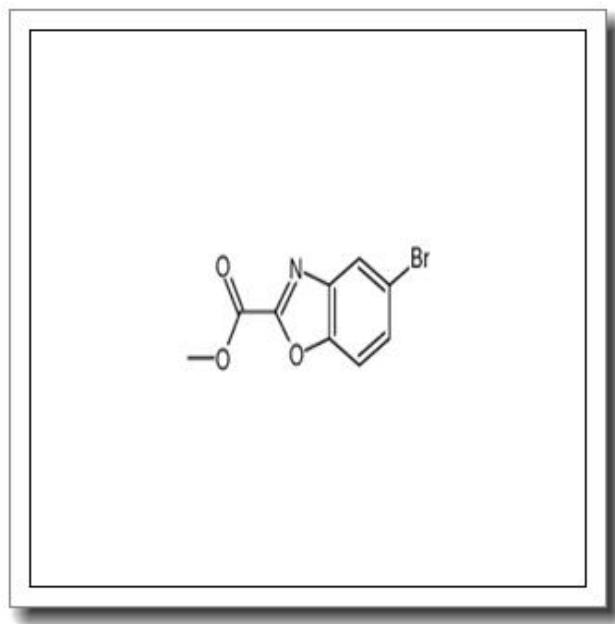


5-溴-2-苯并噁唑羧酸甲酯

Methyl 5-bromobenzo[d]oxazole-2-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 5-bromobenzo[d]oxazole-2-carboxylate
中文名称	5-溴-2-苯并噁唑羧酸甲酯
CAS 号	954239-61-3
分子式	C ₉ H ₆ BrN ₁ O ₃
分子量	256.053
纯度	≥96%

产品说明

5-溴-2-苯并噁唑羧酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-溴-2-苯并噁唑羧酸甲酯 (Methyl 5-bromobenzo[d]oxazole-2-carboxylate) 是一种重要的苯并噁唑类衍生物，化学式为 $C_9H_6BrNO_3$ ，分子量为 256.053，CAS 号为 954239-61-3。本品为白色至类白色结晶性粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，具有典型的芳香杂环结构，其分子中的溴原子和酯基赋予其较高的反应活性，可作为有机合成中的关键中间体。

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的应用价值。苯并噁唑骨架广泛存在于药物分子中，具有抗菌、抗炎及抗肿瘤活性潜力。溴原子的引入进一步增强了其作为亲电试剂的特性，使其在偶联反应（如 Suzuki 偶联）和杂环构建中表现优异。此外，酯基的存在使其易于通过水解或氨解转化为其他功能化衍生物，为药物研发和材料科学提供了灵活的合成路径。

3. 主要应用领域与具体用途

5-溴-2-苯并噁唑羧酸甲酯主要用于以下领域：

- 医药中间体：用于合成具有生物活性的苯并噁唑类化合物，如激酶抑制剂或抗菌剂。
- 材料科学：作为有机发光二极管 (OLED) 或荧光探针的前体材料。
- 学术研究：在有机方法学开发中作为模板分子，研究新型催化反应或官能团转化。

4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于干燥、避光的环境中，推荐储存温度为 2-8°C。长期存放建议充入惰性气体（如氮气）保护。使用时应穿戴防护手套和护目镜，避免吸入粉尘或直接接触皮肤。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和氯仿，微溶于甲醇，使用时需根据反应体系选择合适溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，并提供完整的 COA（质量分析证书）。安全数据表明，其急性毒性（LD50）属中等危害类别，操作时需在通风橱中进行。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地环保法规，禁止直接排放至下水道或自然环境。

注：以上信息基于现有实验数据，具体应用需结合用户实验条件进一步验证。