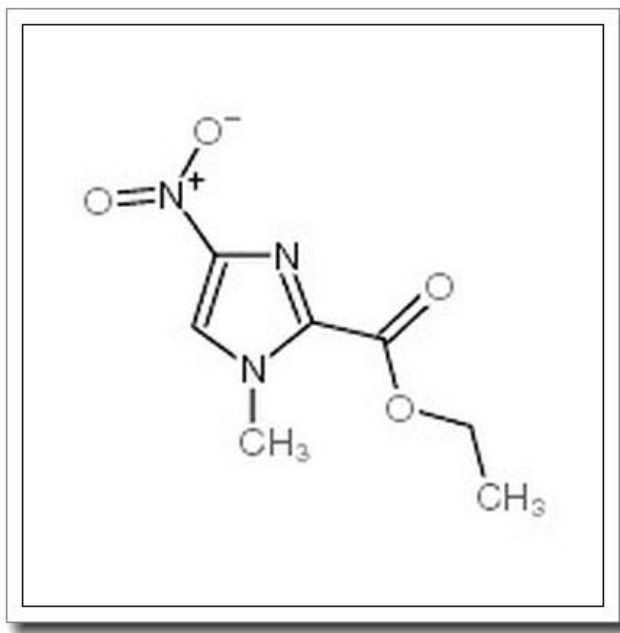


1-甲基-4-硝基咪唑-2-羧酸乙酯

ethyl 1-methyl-4-nitroimidazole-2-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 1-methyl-4-nitroimidazole-2-carboxylate
中文名称	1-甲基-4-硝基咪唑-2-羧酸乙酯
CAS 号	109012-23-9
分子式	C7H9N3O4
分子量	199.164
纯度	>96%

产品说明

1-甲基-4-硝基咪唑-2-羧酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

1-甲基-4-硝基咪唑-2-羧酸乙酯 (ethyl 1-methyl-4-nitroimidazole-2-carboxylate) 是一种硝基咪唑类衍生物，化学式为 $C_7H_9N_3O_4$ ，分子量 199.164，CAS 号为 109012-23-9。本品为白色至淡黄色结晶性粉末，纯度大于 96%，具有典型的硝基咪唑结构特征，其羧酸乙酯基团增强了化合物的脂溶性和反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是咪唑环系统的重要修饰产物，硝基和酯基的引入使其成为合成抗菌、抗寄生虫药物的关键中间体。其结构中的硝基在生物还原条件下可产生活性自由基，这一特性使其在抗厌氧菌药物开发中具有特殊价值。此外，咪唑环的刚性结构也为药物分子设计提供了骨架支持。

3. 主要应用领域与具体用途

作为医药中间体，本品主要用于合成硝基咪唑类抗菌药物，如替硝唑、奥硝唑等第二代 5-硝基咪唑衍生物。在科研领域，可用作：

- 抗微生物药物研究的标准对照品
- 放射性标记前体用于药物代谢研究
- 有机合成中构建杂环化合物的砌块

工业上还可用于特种材料的功能化改性。

4. 储存条件与使用建议

需避光密封保存于干燥环境中，推荐储存条件为 2-8℃ 冷藏。开封后建议充氮保护，避免反复冻融。使用时应在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明，本品易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、甲醇等有机溶剂，水溶性较差 (<0.1 mg/mL)。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据表明：

- 危险代码: Xi (刺激性物质)
- 个人防护需佩戴护目镜和防尘口罩
- 意外接触眼睛时立即用大量清水冲洗 15 分钟
- 废弃物处置应遵守当地化学品处理法规

运输分类为非危险品，但建议使用防震包装。

注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验方案调整。更多技术参数可索取 COA 证书。