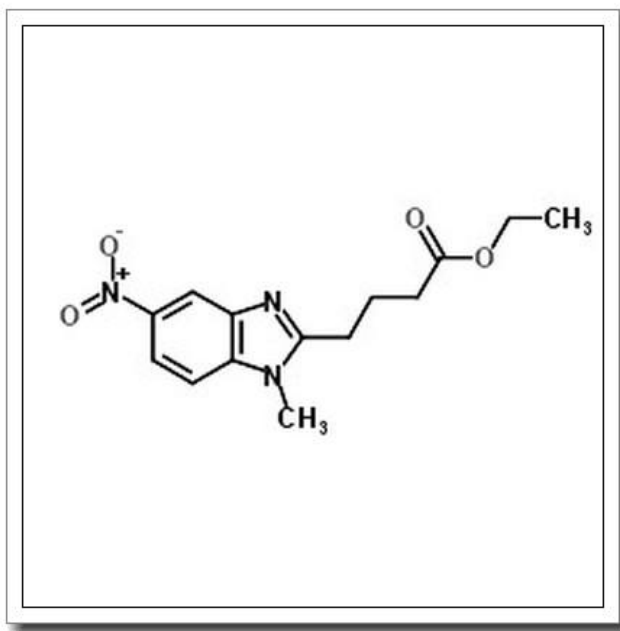


1-甲基-5-硝基-1H-苯并咪唑-2-丁酸乙酯

ethyl 4-(1-methyl-5-nitrobenzimidazol-2-yl)butanoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 4-(1-methyl-5-nitrobenzimidazol-2-yl)butanoate
中文名称	1-甲基-5-硝基-1H-苯并咪唑-2-丁酸乙酯
CAS 号	3543-72-4
分子式	C ₁₄ H ₁₇ N ₃ O ₄
分子量	291.302
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为 1-甲基-5-硝基-1H-苯并咪唑-2-丁酸乙酯 (ethyl 4-(1-methyl-5-nitrobenzimidazol-2-yl)butanoate), CAS 号 3543-72-4, 分子式 C₁₄H₁₇N₃O₄, 分子量 291.302。外观通常为白色至淡黄色结晶或粉末, 纯度 ≥96%。该化合物属于苯并咪唑衍生物, 结构中含硝基和酯基官能团, 具有显著的极性及光敏性, 需避光保存。其溶解性表现为易溶于有机溶剂 (如 DMSO、甲醇), 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯并咪唑类化合物, 该分子可通过硝基还原反应参与生物活性中间体的合成, 其结构中的咪唑环和酯键使其在酶抑制、药物载体设计中具有潜在应用价值。硝基的存在增强了其作为电子受体的能力, 可能参与氧化还原反应或作为荧光探针的构建模块。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药中间体合成, 尤其适用于抗寄生虫药物 (如苯并咪唑类驱虫药) 的研发。在材料科学中, 可用于制备光响应性高分子或配合物。实验室研究中, 常作为硝基芳烃模型化合物, 用于研究自由基反应机制或催化转化实验。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20° C 至 4° C 的干燥环境中, 避免光照及潮湿。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解建议采用预冷的有机溶剂以减少分解风险。

5. 质量控制与安全信息

本品通过 HPLC 检测纯度, 批号关联完整分析证书 (COA)。安全数据表明, 其可能对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时需遵循 GHS 分类: H315 (造成皮肤刺激)、H319 (造成严重眼刺激)。若不慎接触, 立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地法规, 禁止直接排入环境。

(注: 实际应用中请以最新版安全技术说明书 (MSDS) 和实验数据为准。)