

4-氨基-1H-咪唑-5-羧酸乙酯

Ethyl 4-amino-1H-imidazole-5-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl 4-amino-1H-imidazole-5-carboxylate
中文名称	4-氨基-1H-咪唑-5-羧酸乙酯
CAS 号	21190-16-9
分子式	C ₆ H ₉ N ₃ O ₂
分子量	155.155
纯度	>96%

产品说明

4-氨基-1H-咪唑-5-羧酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-氨基-1H-咪唑-5-羧酸乙酯 (Ethyl 4-amino-1H-imidazole-5-carboxylate) 是一种重要的咪唑类衍生物，化学式为 $C_6H_9N_3O_2$ ，分子量为 155.155。该化合物为白色至类白色结晶或粉末，CAS 号为 21190-16-9，纯度标准 >96%。其结构中的氨基和羧酸乙酯基团赋予其独特的反应活性，使其成为有机合成和药物化学中的关键中间体。

2. 生物化学功能与重要性

作为咪唑环的官能化衍生物，该化合物在生物体系中具有潜在的配位和催化作用。咪唑环是组氨酸的核心结构，因此该衍生物可用于模拟生物分子相互作用或开发酶抑制剂。其在核苷酸类似物和嘌呤代谢途径研究中具有特殊价值，可能参与调控细胞信号传导或基因表达过程。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于三个领域：一是医药研发，作为抗病毒药物（如 HIV 蛋白酶抑制剂）和抗肿瘤化合物的合成前体；二是材料科学，用于制备功能化聚合物或配位材料；三是生化研究，作为标记物或探针修饰的中间体。具体用途包括但不限于：有机合成中的氨基保护与脱保护反应、金属有机框架 (MOF) 材料的构建、以及生物共轭化学中的连接子合成。

4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光条件下储存，温度控制在 $2-8^{\circ}C$ ，长期保存需充惰性气体保护。开封后应尽快使用，避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试表明其易溶于极性有机溶剂（如 DMSO、甲醇），水溶性较低，建议先用少量有机溶剂助溶后再进行后续稀释。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 >96%，批次间差异 <2%。核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS)

数据可供验证。安全数据表明，该化合物可能引起眼睛和皮肤刺激，操作时应佩戴防护手套和护目镜。如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地化学品处置法规，不可直接排入下水道。

（注：本说明基于当前研究数据，实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。）