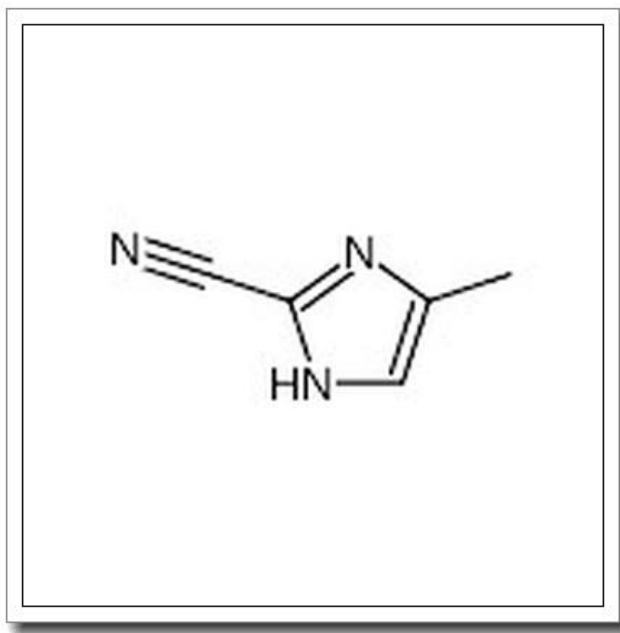


4-甲基-1H-咪唑-2-甲腈

5-Methyl-1H-imidazole-2-carbonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-Methyl-1H-imidazole-2-carbonitrile
中文名称	4-甲基-1H-咪唑-2-甲腈
CAS 号	70631-95-7
分子式	C ₅ H ₅ N ₃
分子量	107.113
纯度	>96%

产品说明

5-甲基-1H-咪唑-2-甲腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-甲基-1H-咪唑-2-甲腈（英文名：5-Methyl-1H-imidazole-2-carbonitrile）是一种含氮杂环化合物，CAS 号为 70631-95-7，分子式 C₅H₅N₃，分子量 107.113。本品为白色至类白色结晶性粉末，纯度>96%，具有咪唑环的典型化学性质，包括弱碱性和配位能力。其结构中的氰基（-CN）和咪唑环共同赋予该化合物较高的反应活性，可作为有机合成中的重要中间体。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学领域具有多重功能。咪唑环结构使其能够模拟组氨酸残基的配位特性，在金属酶研究中作为配体模型。氰基的引入增强了其与生物大分子（如蛋白质或核酸）的相互作用能力，因此在药物设计和生化探针开发中具有潜在价值。其结构特征也使其成为研究细胞信号传导和酶抑制机制的工具分子。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发中，本品常用于构建抗真菌和抗肿瘤化合物的核心骨架。在材料科学领域，可作为制备导电高分子材料的单体。农业化学中用于合成新型杀虫剂和杀菌剂。此外，在分析化学中，其衍生物可用作高效液相色谱（HPLC）的荧光标记试剂。具体实验用途包括：有机合成砌块、金属配合物前体、小分子抑制剂库构建等。

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℃，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，本品易溶于二甲基亚砜（DMSO）、甲醇等极性有机溶剂，水溶性较差（<1 mg/mL），建议先用有机溶剂助溶后再稀释至工作浓度。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度，批号相关的 COA（质量分析证书）可随货提供。安全

数据表明, 该化合物对眼睛和呼吸道有刺激性, 操作时应佩戴护目镜和防尘口罩。急性毒性数据 (LD50 大鼠经口): >500 mg/kg。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。如发生泄漏, 需用惰性吸附材料收集后交由专业机构处理。

注: 本说明基于现有研究数据编制, 具体应用需结合实验条件优化。建议使用者查阅最新文献并开展预实验验证。