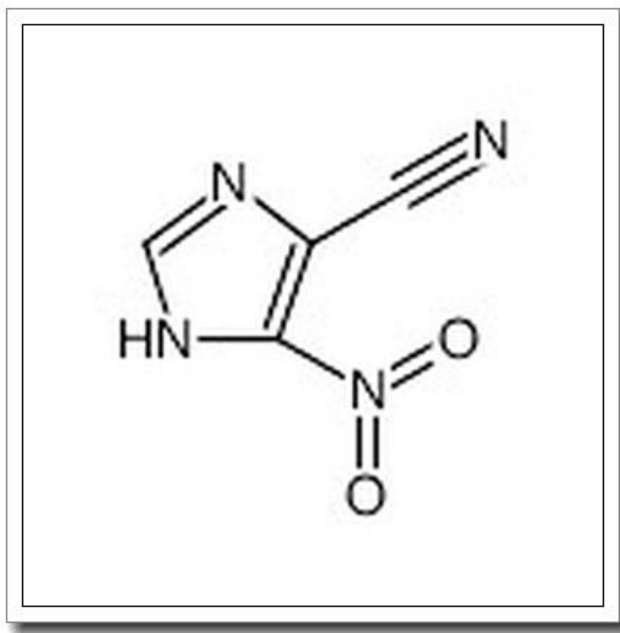


4-硝基咪唑-5-甲腈

1H- Imidazole- 4- carbonitrile, 5- nitro



产品基本信息

属性	值
化学名称	1H- Imidazole- 4- carbonitrile, 5- nitro
中文名称	4-硝基咪唑-5-甲腈
CAS 号	208510-03-6
分子式	C4H2N4O2
分子量	138.084
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1H-咪唑-4-甲腈, 5-硝基 (4-硝基咪唑-5-甲腈) 是一种高纯度有机化合物, 化学式为 $C_4H_2N_4O_2$, 分子量为 138.084。其 CAS 号为 208510-03-6, 外观通常为浅黄色至棕色结晶粉末。该化合物属于硝基咪唑类衍生物, 具有咪唑环结构, 并在 5 位引入硝基、4 位连接甲腈基团, 赋予其独特的电子效应和反应活性。其纯度标准 >96%, 适用于精细化学合成及医药研发领域。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为咪唑类中间体, 其硝基和甲腈基团使其成为重要的合成砌块, 尤其在杂环化合物构建中表现突出。硝基的强吸电子特性可调节分子极性, 而甲腈基团则提供进一步官能团转化的可能性。在生物化学研究中, 此类结构常作为酶抑制剂或药物活性分子的核心骨架, 例如在抗肿瘤、抗菌药物的先导化合物优化中具有潜在价值。

3. 主要应用领域与具体用途

4-硝基咪唑-5-甲腈主要用于医药中间体合成, 特别是用于开发新型咪唑类抗感染药物或靶向治疗剂。在材料科学领域, 可作为配体参与金属有机框架 (MOF) 材料的制备。此外, 其衍生物在农用化学品研发中也有应用, 如杀虫剂或除草剂的活性成分修饰。

4. 储存条件与使用建议

本品需避光保存于干燥、密闭的容器中, 推荐储存温度为 2-8°C, 长期存放建议充氮保护。使用时应穿戴防护手套、护目镜及实验服, 避免吸入粉尘或接触皮肤。溶解性测试表明其易溶于极性有机溶剂 (如 DMF、DMSO), 水溶性较低, 实验配制需根据具体需求选择溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 >96%, 批次间稳定性良好。安全数据表明, 该化合物对眼睛和呼吸道有刺激性, 操作应在通风橱中进行。若不慎接触, 立即用大量清水冲

洗并就医。废弃物处置需符合当地化学品管理法规，禁止直接排放至环境中。详细毒理学数据可参考产品安全技术说明书（MSDS）。