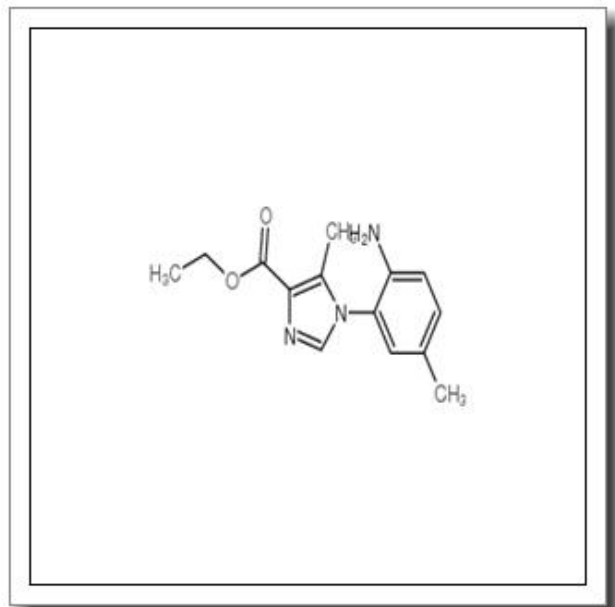


1-(2-氨基-5-甲基苯基)-5-甲基-1H-咪唑-4-羧酸乙酯

ethyl 1-(2-amino-5-methylphenyl)-5-methyl-1H-imidazole-4-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 1-(2-amino-5-methylphenyl)-5-methyl-1H-imidazole-4-carboxylate
中文名称	1-(2-氨基-5-甲基苯基)-5-甲基-1H-咪唑-4-羧酸乙酯
CAS 号	164330-69-2
分子式	C ₁₄ H ₁₇ N ₃ O ₂
分子量	259.304
纯度	≥96%

产品说明

1-(2-氨基-5-甲基苯基)-5-甲基-1H-咪唑-4-羧酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 ethyl 1-(2-amino-5-methylphenyl)-5-methyl-1H-imidazole-4-carboxylate，CAS 号 164330-69-2，分子式 C₁₄H₁₇N₃O₂，分子量 259.304。纯度 ≥96%，可通过 HPLC 验证。该化合物属于咪唑类衍生物，结构中含氨基和羧酸酯基团，兼具亲水性与疏水性，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

作为咪唑环修饰的芳香族化合物，其结构中的氨基和酯基赋予其分子识别与配位能力，在药物化学中常作为中间体用于构建靶向分子。氨基苯基片段可参与偶联反应，而咪唑环则可能影响生物活性，如酶抑制或受体调节。该分子在抗肿瘤、抗炎等药物研发中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发领域，具体包括：1) 作为合成抗肿瘤药物（如激酶抑制剂）的关键中间体；2) 用于构建小分子探针，研究蛋白质-配体相互作用；3) 在农药化学中用于开发新型杀菌剂。实验室级产品适用于克级至公斤级放大合成。

4. 储存条件与使用建议

建议储存于 -20° C 避光干燥环境中，长期保存需充氮密封。开封后需在干燥器内保存，避免吸湿。使用时需在惰性气体（如氮气）保护下操作，建议佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。溶解性测试推荐优先使用 DMSO，配制溶液后建议现配现用。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 及质谱验证，符合实验室试剂标准。MSDS 数据显示其急性毒性较低（LD₅₀ 未明确），但仍需避免吸入或皮肤直接接触。废弃物处理应遵守有

机化学品处置规范，不可直接排放至下水道。如发生泄漏，需用惰性吸附材料处理并通风。

注：本说明仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。具体应用需进一步验证合规性。