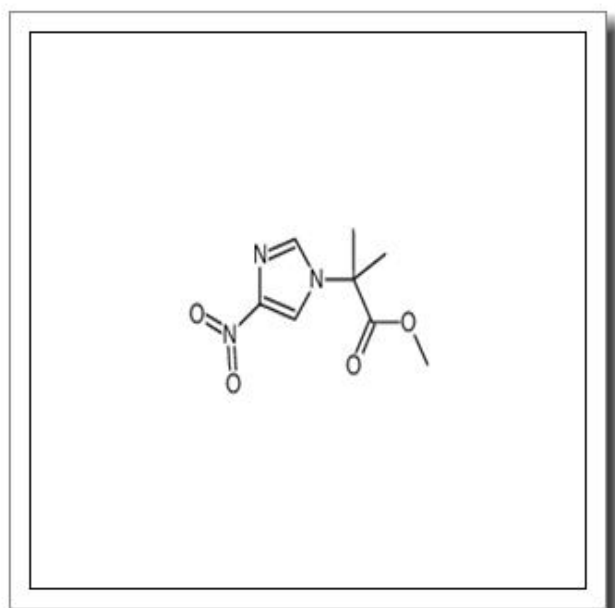


2-methyl-2-(4-nitroimidazol-1-yl)propionic acid methyl ester

2-methyl-2-(4-nitroimidazol-1-yl)propionic acid methyl ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-methyl-2-(4-nitroimidazol-1-yl)propionic acid methyl ester
中文名称	2-methyl-2-(4-nitroimidazol-1-yl)propionic acid methyl ester
CAS 号	865774-07-8
分子式	C ₈ H ₁₁ N ₃ O ₄
分子量	213.191
纯度	≥ 96%

产品说明

2-methyl-2-(4-nitroimidazol-1-yl)propionic acid methyl ester 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至淡黄色结晶性粉末，化学名称为 2-methyl-2-(4-nitroimidazol-1-yl)propionic acid methyl ester，CAS 号为 865774-07-8，分子式为 C₈H₁₁N₃O₄，分子量为 213.191。其纯度经高效液相色谱（HPLC）分析确认 ≥96%，具有明确的确基咪唑骨架和酯基结构，在有机溶剂如甲醇、乙醇中具有良好溶解性，水溶性较低。该化合物在常温下稳定，但需避光保存以防光解。

2. 生物化学功能与重要性

作为硝基咪唑类衍生物，该化合物可通过硝基还原酶作用在低氧环境中发生生物还原，生成具有细胞毒性的活性中间体，这一特性使其在抗肿瘤和抗寄生虫药物研发中具有重要价值。其酯基结构可增强细胞膜穿透性，常用于前药设计或作为合成中间体修饰生物活性分子的药代动力学特性。

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：抗肿瘤药物开发中作为缺氧选择性细胞毒剂候选分子；抗感染药物研究中用于构建针对厌氧菌或寄生虫的靶向化合物；化学探针合成中作为荧光标记或放射性同位素标记的载体基团。此外，在材料科学中可用于含能材料的改性研究。

4. 储存条件与使用建议

建议储存于-20℃、干燥避光环境中，开封后需充惰性气体保护。使用前需恢复至室温并避免反复冻融。实验操作应在通风橱中进行，佩戴防护手套及护目镜。溶解推荐使用无水 DMF 或 DMSO，工作浓度需根据具体实验体系优化。

5. 质量控制与安全信息

本产品经核磁共振（NMR）和质谱（MS）验证结构，批次间纯度差异 ≤2%。安全数据表明其急性毒性为 LD₅₀ > 500 mg/kg（大鼠口服），但可能对眼睛和呼吸道产生

刺激。废弃物处理需符合危险化学品管理条例，建议通过专业机构进行无害化处理。

注：本说明仅提供基础信息，具体实验方案需结合文献与法规要求制定。