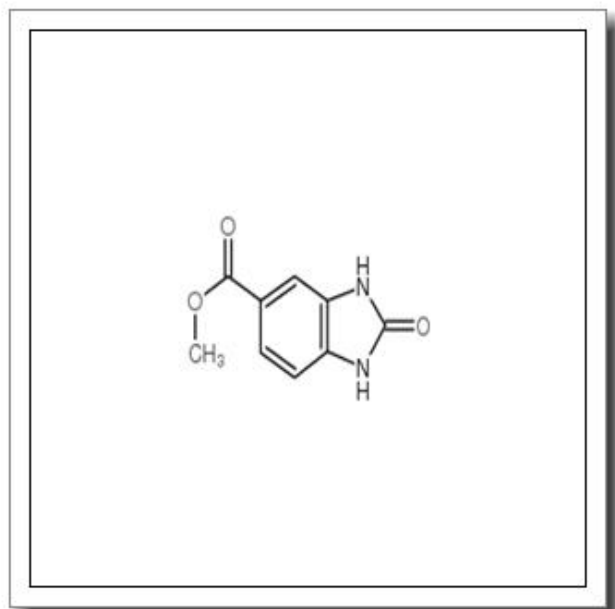


2-氧代-2,3-二氢-1H-1,3-苯并咪唑-5-羧酸甲酯

Methyl 2-oxo-2,3-dihydro-1H-benzo[d]imidazole-5-carboxylate



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|---|
| 化学名称 | Methyl 2-oxo-2,3-dihydro-1H-benzo[d]imidazole-5-carboxylate |
| 中文名称 | 2-氧代-2,3-二氢-1H-1,3-苯并咪唑-5-羧酸甲酯 |
| CAS 号 | 106429-57-6 |
| 分子式 | C ₉ H ₈ N ₂ O ₃ |
| 分子量 | 192.171 |
| 纯度 | ≥ 96% |

产品说明

2-氧代-2,3-二氢-1H-1,3-苯并咪唑-5-羧酸甲酯 (Methyl 2-oxo-2,3-dihydro-1H-benzo[d]imidazole-5-carboxylate) 是一种重要的苯并咪唑类衍生物, CAS 号为 106429-57-6, 分子式为 C₉H₈N₂O₃, 分子量为 192.171。本品为白色至类白色结晶性粉末, 纯度不低于 96%, 具有良好的化学稳定性和溶解性, 可溶于多种有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO。

1. 产品概述与化学特性

该化合物属于苯并咪唑酮类结构, 其分子中的羧酸甲酯和 2-氧代结构使其成为有机合成中的关键中间体。其熔点和沸点数据需通过实验测定, 建议在使用前通过 TLC 或 HPLC 验证纯度。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯并咪唑衍生物, 该化合物在药物化学中具有重要价值。其结构骨架常见于多种生物活性分子, 如蛋白酶抑制剂和抗菌剂。2-氧代基团可参与氢键形成, 增强与靶标蛋白的相互作用, 因此在先导化合物优化中备受关注。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药研发领域, 具体包括:

- 作为合成抗肿瘤或抗感染药物的中间体
- 用于构建杂环化合物库的高效砌块
- 在材料科学中用于功能化聚合物的改性

4. 储存条件与使用建议

建议在-20° C 下避光保存, 长期储存需充惰性气体保护。使用时需在干燥环境下操作, 避免与强氧化剂接触。溶解时建议先进行小剂量溶解度测试。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 批号相关 COA 可随货提供。安全数据如下:

- 可能引起眼睛和皮肤刺激
- 操作时需佩戴防护手套和护目镜

- 意外接触时立即用大量清水冲洗
- 废弃物处理需符合当地化学品处置法规

注：本说明所述信息基于现有研究数据，实际应用前请务必查阅最新文献并开展小规模试验验证。