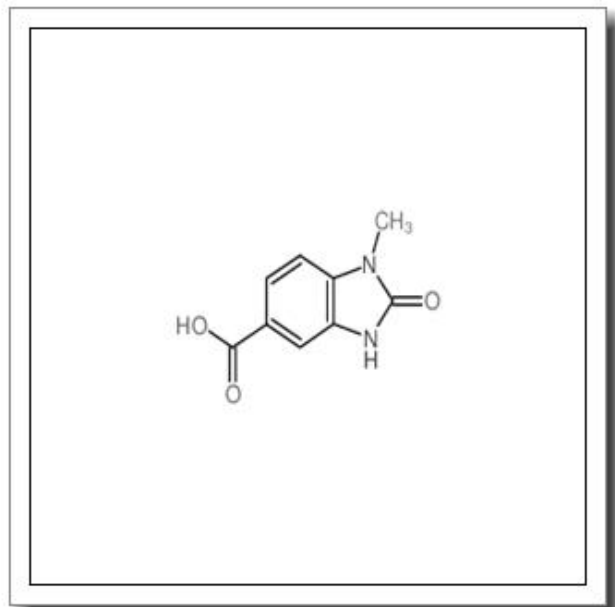


# (9ci)-2,3-二氢-1-甲基-2-氧代-1H-苯并咪唑-5-羧酸

*1-methyl-2-oxo-3H-benzimidazole-5-carboxylic acid*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	1-methyl-2-oxo-3H-benzimidazole-5-carboxylic acid
中文名称	(9ci)-2,3-二氢-1-甲基-2-氧代-1H-苯并咪唑-5-羧酸
CAS 号	19950-97-1
分子式	C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
分子量	192.171
纯度	≥96%

## 产品说明

### 1-甲基-2-氧代-3H-苯并咪唑-5-羧酸产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 1-methyl-2-oxo-3H-benzimidazole-5-carboxylic acid, 中文系统命名为(9ci)-2,3-二氢-1-甲基-2-氧代-1H-苯并咪唑-5-羧酸, CAS 号为 19950-97-1。其分子式为 C<sub>9</sub>H<sub>8</sub>N<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, 分子量为 192.171, 是一种含苯并咪唑骨架的杂环羧酸衍生物。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度≥96%, 具有典型的芳香杂环酸类化合物的化学性质, 可溶于极性有机溶剂如 DMSO、甲醇, 微溶于水。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为苯并咪唑类化合物的关键中间体, 其结构中的羧基和咪唑环赋予分子两性特性, 既能参与氢键形成, 又可作为金属离子配位点。在生物体系中, 此类结构常作为酶抑制剂或受体调节剂的药效团, 尤其在组蛋白去乙酰化酶 (HDAC) 和激酶抑制剂的开发中具有重要价值。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于医药研发和有机合成领域。在药物化学中, 它是构建抗肿瘤、抗炎及抗病毒先导化合物的核心骨架, 例如用于蛋白酶体抑制剂和 DNA 嵌入剂的结构优化。在材料科学中, 可作为配体用于金属有机框架 (MOF) 材料的合成。此外, 也常用于生化试剂盒开发中作为标准品或对照品使用。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于-20℃干燥环境中, 避免光照和潮湿。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时需在干燥环境下操作, 建议佩戴防护手套和护目镜。溶解时优先选用 DMSO 或碱性水溶液 (pH>8), 配制后溶液建议现配现用, 长期储存需分装冻存。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度≥96%, 重金属含量<10ppm, 符合生化试剂标准。安全数据

表明其具有刺激性，接触皮肤或眼睛应立即用大量清水冲洗。废弃物处理需遵守有机危险废物处置规范，不可直接排入下水道。详细毒理学数据可参考 MSDS 第 3.2 节（急性毒性：LD50 大鼠经口>500mg/kg）。

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验证。