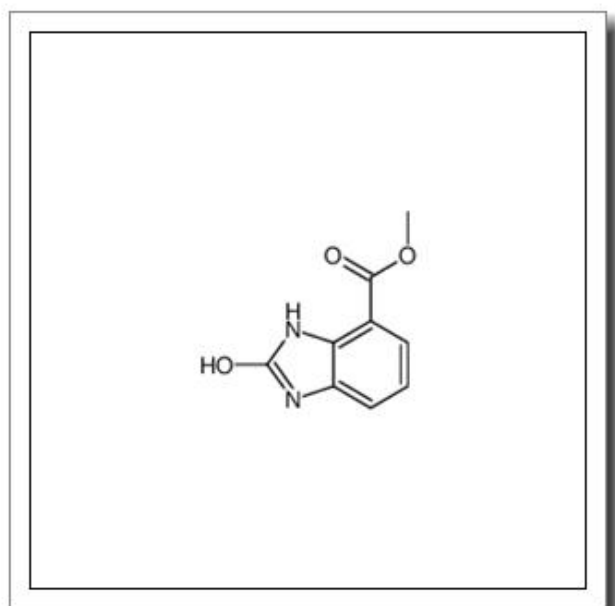


methyl 2-oxo-1,3-dihydrobenzimidazole-4-carboxylate

methyl 2-oxo-1,3-dihydrobenzimidazole-4-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 2-oxo-1,3-dihydrobenzimidazole-4-carboxylate
中文名称	methyl 2-oxo-1,3-dihydrobenzimidazole-4-carboxylate
CAS 号	860187-45-7
分子式	C ₉ H ₈ N ₂ O ₃
分子量	192.171
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶粉末，化学名称为 methyl 2-oxo-1,3-dihydrobenzimidazole-4-carboxylate，CAS 号为 860187-45-7，分子式为 C₉H₈N₂O₃，分子量为 192.171。其纯度 ≥96%，结构中含有苯并咪唑酮骨架和羧酸甲酯基团，属于杂环化合物衍生物。该化合物在常温下稳定，微溶于水，易溶于有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO。其熔点和沸点数据需参考具体实验测定值，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

作为苯并咪唑类化合物的关键中间体，该分子具有显著的生物活性潜力。其结构中的 2-氧代基团和酯基可参与多种化学反应，如水解、缩合或亲核取代，是构建药物活性分子的重要模块。在生物体内，类似结构常与酶活性位点相互作用，可能表现出抗菌、抗炎或激酶抑制活性，具体功能需通过后续衍生化研究确认。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发和有机合成领域。在药物化学中，它是合成抗寄生虫药（如苯并咪唑类驱虫剂）和抗癌先导化合物的关键中间体。在材料科学中，可用于制备荧光标记物或配位聚合物。实验室级用途包括作为杂环化合物研究的标准品，或用于开发新型酶抑制剂。使用时应根据目标产物设计具体合成路径，建议参考相关文献优化反应条件。

4. 储存条件与使用建议

需密封保存于干燥、避光的惰性环境中，推荐储存温度为 2-8℃。长期保存建议充氮保护，避免与强氧化剂、酸酐类物质共同存放。使用前需恢复至室温并充分干燥，称量时需在通风橱中操作。溶解性测试表明，配制 10mM DMSO 储备液时可超声辅助溶解。工作液建议现配现用，避免反复冻融。

5. 质量控制与安全信息

本品通过 HPLC 检测纯度，批号关联 COA 报告。潜在危害包括皮肤刺激（GHS 分类

Category 2) 和眼睛损伤 (Category 1), 操作时应佩戴护目镜、防渗透手套及实验服。如接触皮肤, 立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物处理需符合当地法规, 不可直接排入下水道。安全数据表 (SDS) 包含详细毒理学数据和应急处理措施, 使用前务必查阅。