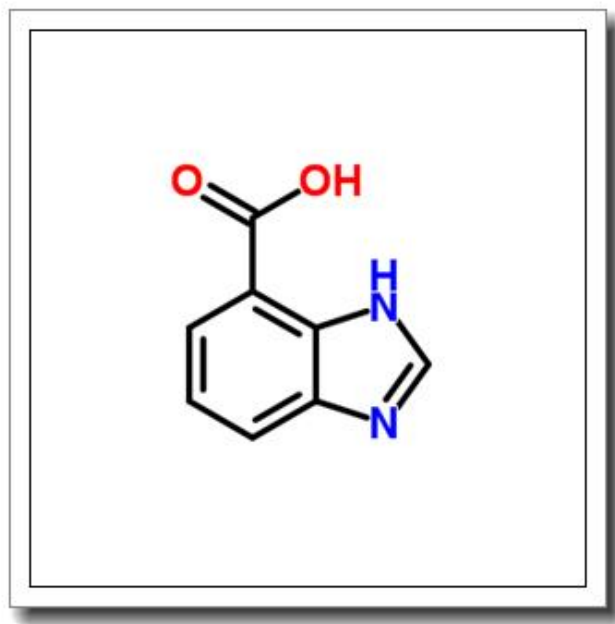


苯并咪唑-4-羧酸

1H-Benzimidazole-4-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	1H-Benzimidazole-4-carboxylic acid
中文名称	苯并咪唑-4-羧酸
CAS 号	46006-36-4
分子式	C ₈ H ₆ N ₂ O ₂
分子量	162.145
纯度	≥ 96%

产品说明

1H-Benzimidazole-4-carboxylic acid (苯并咪唑-4-羧酸) 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

1H-Benzimidazole-4-carboxylic acid 是一种含氮杂环羧酸化合物，化学式为 $C_8H_6N_2O_2$ ，分子量为 162.145，CAS 号为 46006-36-4。本品为白色至类白色结晶性粉末，纯度 $\geq 96\%$ ，可溶于极性有机溶剂（如 DMSO、甲醇），微溶于水。其结构兼具苯并咪唑环的碱性与羧酸基团的酸性，在 pH 调节下可形成两性离子，适合作为有机合成中间体或配体使用。

2. 生物化学功能与重要性

苯并咪唑-4-羧酸是构建生物活性分子的关键骨架，其苯并咪唑环可嵌入 DNA 碱基对，而羧酸基团便于衍生化修饰。该化合物在酶抑制研究中表现出潜力，尤其与金属酶（如碳酸酐酶）的活性位点结合能力显著，可用于开发抗肿瘤或抗菌先导化合物。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于医药研发与材料科学领域：

- 医药中间体：用于合成蛋白酶抑制剂、激酶抑制剂及抗寄生虫药物（如阿苯达唑类衍生物）。
- 配位化学：作为双齿配体与过渡金属（Cu、Zn 等）形成稳定配合物，用于催化或荧光探针设计。
- 材料科学：参与构建共价有机框架（COFs）或功能化高分子材料。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，避光、防潮，温度控制在 $2-8^{\circ}C$ （长期保存建议 $-20^{\circ}C$ ）。使用前需恢复至室温以避免结露。建议在惰性气体（如氮气）保护下进行反应，羧酸基团易与胺类、醇类发生缩合反应，需严格无水操作。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据：

- 危害提示: 可能引起眼睛/皮肤刺激, 吸入或误食有害。
- 防护措施: 操作时佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套, 在通风橱中使用。
- 应急处理: 接触皮肤后立即用肥皂水冲洗, 误食需就医。

(注: 本说明基于现有研究数据, 实际应用需结合具体实验条件验证。)