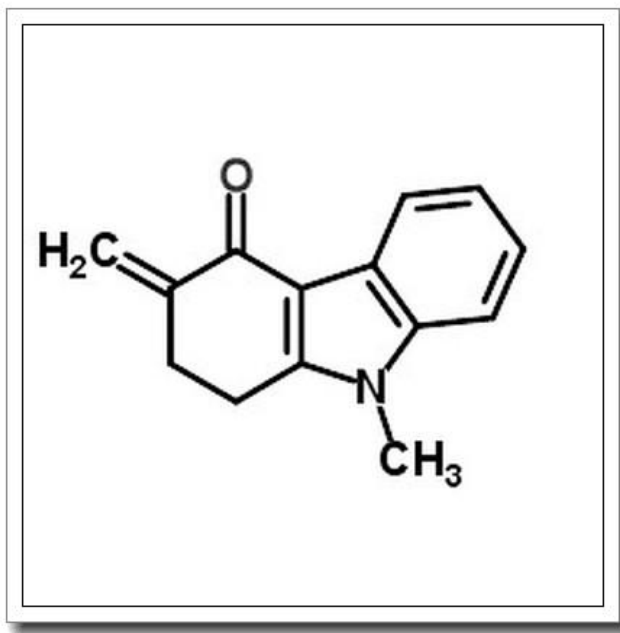


1,2,3,9-四氢-9-甲基-3-亚甲咔唑酮

9-Methyl-3-methylene-2,3-dihydro-1H-carbazol-4(9H)-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	9-Methyl-3-methylene-2,3-dihydro-1H-carbazol-4(9H)-one
中文名称	1,2,3,9-四氢-9-甲基-3-亚甲咔唑酮
CAS 号	99614-64-9
分子式	C ₁₄ H ₁₃ N ₀
分子量	211.259
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品为 9-甲基-3-亚甲基-2,3-二氢-1H-咪唑-4(9H)-酮 (1,2,3,9-四氢-9-甲基-3-亚甲咪唑酮), 化学式为 $C_{14}H_{13}NO$, 分子量 211.259, CAS 号 99614-64-9。该化合物属于咪唑酮衍生物, 纯度高于 96%, 常温下呈白色至淡黄色结晶或粉末状。其结构特征为咪唑骨架的 9 位甲基取代及 3 位亚甲基修饰, 赋予其独特的电子分布和反应活性, 适合作为有机合成中间体或生物活性分子研究的核心结构。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其咪唑酮母核结构, 表现出显著的生物活性潜力。咪唑类衍生物在天然产物中广泛存在, 具有抗菌、抗肿瘤及神经保护等特性。9-甲基-3-亚甲基的引入可增强其脂溶性, 可能影响细胞膜穿透能力, 在药物设计中被用于优化先导化合物的药代动力学性质。此外, 其共轭体系可作为荧光探针的构建模块, 应用于生物标记领域。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发中, 本品常用于抗肿瘤药物 (如拓扑异构酶抑制剂) 或抗菌剂的合成前体。材料科学领域则利用其刚性共轭结构开发有机光电材料, 如 OLED 发光层或半导体聚合物。实验室研究中, 可作为标准品用于咪唑类代谢产物的分析检测, 或作为酶抑制剂筛选的候选分子。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 的干燥环境中, 避免光照及潮湿。长期储存需充惰性气体保护。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和氯仿, 微溶于甲醇, 水溶性较差, 配制溶液时需根据实验需求选择适当溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 批次间差异控制在 $\pm 1\%$ 以内。安全数据表明, 其急性毒性 (LD50) 需参考具体动物实验数据, 操作时应避免吸入或皮肤接触。废弃物

处置需符合有机有害化学品规范，不可直接排放至环境中。如发生泄漏，需用吸附材料收集并按危险废物处理。详细毒理学数据可参考随附的MSDS（材料安全数据表）。