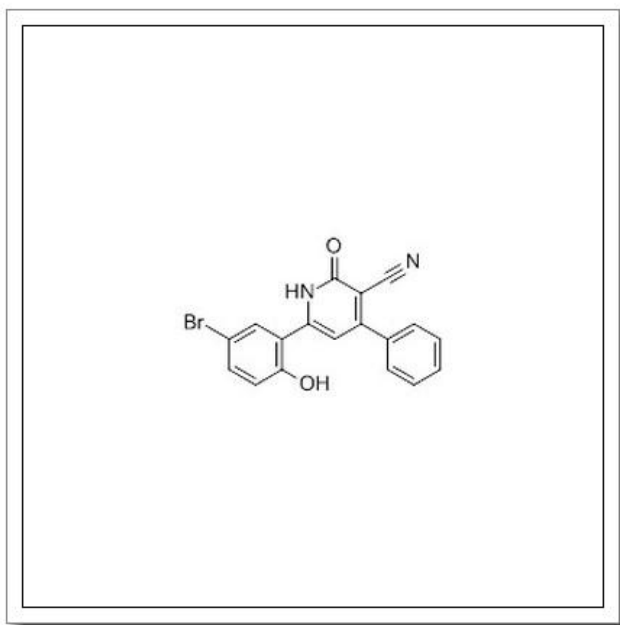


3-氰基-4-苯基-6-(3-溴-6-羟基苯基)- 2(1H)-吡啶酮

*6-(5-Bromo-2-hydroxyphenyl)-2-oxo-4-phenyl-1,2-dihydro-3-pyridine
carbonitrile*



产品基本信息

属性	值
化学名称	6-(5-Bromo-2-hydroxyphenyl)-2-oxo-4-phenyl-1,2-dihydro-3-pyridine carbonitrile
中文名称	3-氰基-4-苯基-6-(3-溴-6-羟基苯基)-2(1H)-吡啶酮
CAS 号	491871-58-0
分子式	C ₁₈ H ₁₁ BrN ₂ O ₂
分子量	367.196
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品为 6-(5-溴-2-羟基苯基)-2-氧代-4-苯基-1,2-二氢-3-吡啶甲腈（化学名称），中文名称为 3-氰基-4-苯基-6-(3-溴-6-羟基苯基)-2(1H)-吡啶酮，CAS 号为 491871-58-0。其分子式为 C₁₈H₁₁BrN₂O₂，分子量为 367.196，纯度高于 96%。该化合物是一种含溴芳香族杂环衍生物，兼具苯酚和吡啶酮结构，具有显著的电子离域特性，在紫外-可见光区表现出特征吸收。其固态为类白色至浅黄色结晶粉末，需避光保存以确保稳定性。

2. 生物化学功能与重要性

该分子结构中羟基与氰基的协同作用使其可作为激酶抑制剂的药效团核心，尤其在 ATP 结合位点的相互作用中表现出高选择性。溴原子的引入增强了疏水性，有利于跨膜运输和靶标结合。其吡啶酮骨架是多种生物活性分子的关键结构单元，在调节细胞信号通路（如 MAPK 或 PI3K/AKT）中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

作为医药中间体，主要用于合成抗肿瘤和抗炎候选化合物，特别是在开发 Bruton 酪氨酸激酶（BTK）抑制剂方面具有研究价值。在化学生物学领域，可用作荧光探针前体，因其苯酚羟基易被修饰为标记基团。此外，还可作为有机合成中的多官能团砌块，用于构建复杂杂环体系。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20°C、惰性气体（如氩气）保护下长期储存，短期使用可置于 2-8°C 干燥环境中。开封前需平衡至室温以避免吸湿。溶解时优先选用无水 DMSO 或 DMF，配制成 10 mM 母液后分装冻存。工作浓度需根据实验体系优化，建议进行浓度梯度测试（0.1-100 μM 范围）。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC（C18 反相柱，乙腈/水梯度洗脱）和质谱联用技术确保纯度 >96%，批次间保留时间偏差 <0.5%。该产品对眼睛和呼吸道有刺激性，操作时应佩戴护目镜和

防尘口罩。皮肤接触后需立即用大量肥皂水冲洗，若吸入需转移至空气新鲜处。废弃物应作为有害化学品处置，符合当地环保法规。

（注：本说明基于现有研究数据编制，实际应用前请查阅最新文献并开展预实验验证。）