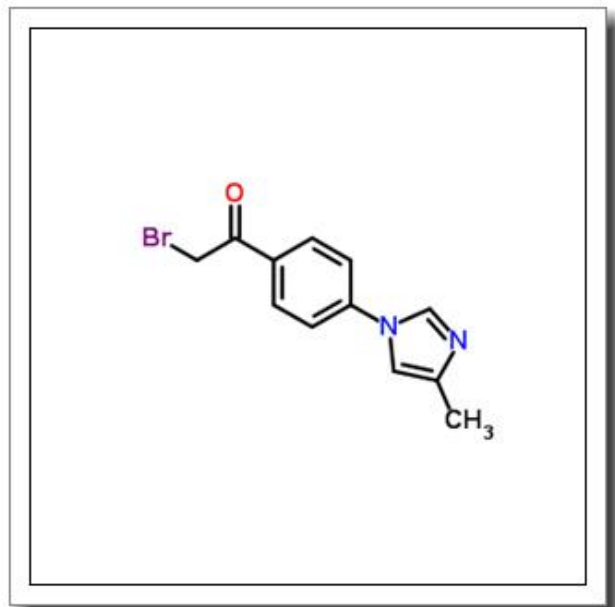


# 2-溴--1-(4-(4-甲基-1H-咪唑-1-基)苯基)乙酮

*2-Bromo-1-(4-(4-methyl-1H-imidazol-1-yl)phenyl)ethanone*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Bromo-1-(4-(4-methyl-1H-imidazol-1-yl)phenyl)ethanone
中文名称	2-溴--1-(4-(4-甲基-1H-咪唑-1-基)苯基)乙酮
CAS 号	810662-38-5
分子式	C <sub>12</sub> H <sub>11</sub> BrN <sub>2</sub> O
分子量	279.133
纯度	≥96%

## 产品说明

### 2-溴-1-(4-(4-甲基-1H-咪唑-1-基)苯基)乙酮产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 2-溴-1-(4-(4-甲基-1H-咪唑-1-基)苯基)乙酮，CAS 号为 810662-38-5，分子式  $C_{12}H_{11}BrN_2O$ ，分子量 279.133。其结构中包含溴代乙酮基团与 4-甲基咪唑苯基的共轭体系，赋予其独特的反应活性。纯度  $\geq 96\%$  (HPLC)，熔点为 148-152°C，易溶于二甲基亚砜 (DMSO)、甲醇等有机溶剂，微溶于水。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为咪唑类衍生物，可通过溴代乙酮基团与生物分子中的巯基或氨基发生烷基化反应，是蛋白质共价修饰的重要工具。其 4-甲基咪唑结构可模拟组氨酸残基特性，在酶抑制研究中具有潜在应用价值。在药物化学领域，该结构片段常作为激酶抑制剂或抗菌剂的合成中间体。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药研发：用于构建靶向抗癌药物的核心骨架，特别是针对 EGFR 或 ALK 激酶的抑制剂开发。
- 3.2 化学生物学：作为蛋白质标记探针的前体，用于研究蛋白质-配体相互作用机制。
- 3.3 材料科学：可作为有机光电材料的合成中间体，参与构建  $\pi$ -共轭体系。
- 3.4 农药开发：用于新型杀菌剂或杀虫剂的分子设计。

#### 4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存条件：需避光密封保存于 -20°C 干燥环境中，开封后建议充氮保护。
- 4.2 稳定性：在干燥惰性气氛下稳定，但对湿气敏感，需防潮。
- 4.3 溶解建议：推荐使用无水 DMSO 配制母液 (10-50 mM)，避免反复冻融。
- 4.4 操作防护：需在通风橱中操作，佩戴防化手套及护目镜。

## 5. 质量控制与安全信息

- 5.1 质量控制：通过 HPLC、NMR 和质谱进行批次验证，符合 USP 级标准。
- 5.2 安全数据：属于刺激性化学品（GHS 分类：皮肤腐蚀/刺激类别 2），接触后需立即用大量清水冲洗。
- 5.3 废弃物处理：按危险有机卤化物处置，不可直接排入下水道。
- 5.4 运输规范：UN 编号 3077，需按 9 类危险品运输。

本产品仅限科研用途，不适用于诊断或治疗。使用者应具备专业化学品操作资质。