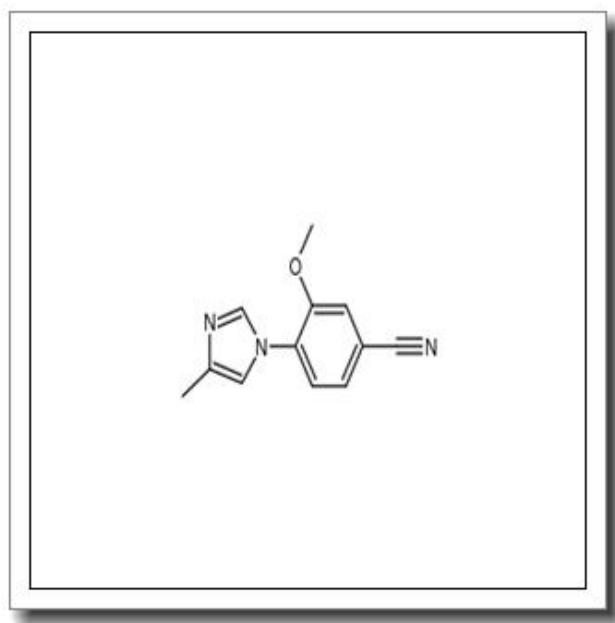


3-methoxy-4-(4-methyl-1H-imidazol-1-yl)benzotrile

3-methoxy-4-(4-methyl-1H-imidazol-1-yl)benzotrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-methoxy-4-(4-methyl-1H-imidazol-1-yl)benzotrile
中文名称	3-methoxy-4-(4-methyl-1H-imidazol-1-yl)benzotrile
CAS 号	1243204-92-3
分子式	C ₁₂ H ₁₁ N ₃ O
分子量	213. 235
纯度	≥ 96%

产品说明

3-甲氧基-4-(4-甲基-1H-咪唑-1-基)苯甲腈产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-甲氧基-4-(4-甲基-1H-咪唑-1-基)苯甲腈 (CAS 号: 1243204-92-3) 是一种含咪唑环和氰基的芳香族化合物, 分子式为 $C_{12}H_{11}N_3O$, 分子量为 213.235。本品为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 具有较高的化学稳定性和溶解性, 可溶于常见有机溶剂如 DMSO、甲醇和乙醇。其结构中的甲氧基和咪唑基团赋予其独特的电子效应, 使其在药物化学和材料科学领域具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其咪唑环的碱性特性及氰基的极性, 可作为生物活性分子的关键中间体。咪唑环常见于多种酶抑制剂和受体配体的结构中, 而氰基则可能参与氢键形成或作为代谢修饰位点。其在激酶抑制剂、G 蛋白偶联受体调节剂等药物研发中具有潜在应用价值, 可能影响细胞信号传导或代谢途径。

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。具体用途包括: 作为小分子抑制剂的核心骨架, 用于抗肿瘤或抗炎药物的结构优化; 作为荧光探针或传感器的构建模块, 利用其共轭体系实现光学信号传导; 在材料科学中, 可作为配体参与金属有机框架 (MOF) 的合成。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光干燥储存, 长期保存需充惰性气体保护。使用时需在干燥环境下操作, 避免接触强氧化剂或酸碱物质。溶解时建议先以少量 DMSO 助溶, 再稀释至目标浓度。实验操作需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 并提供质谱和核磁共振谱图验证结构。安全信息提示: 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激, 操作应在通风橱中进行。若不慎接触, 立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。

——本说明仅限科研用途，不适用于诊断或治疗——