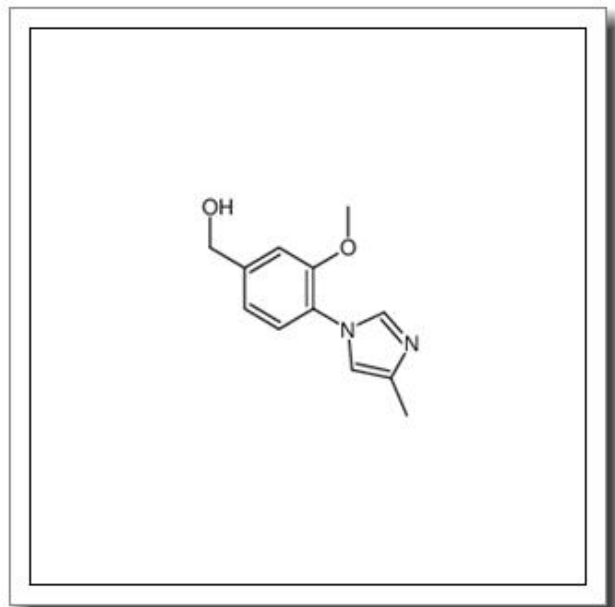


(3-甲氧基-4-(4-甲基-1H-咪唑-1-基)苯基)甲醇

[3-methoxy-4-(4-methylimidazol-1-yl)phenyl]methanol



产品基本信息

属性	值
化学名称	[3-methoxy-4-(4-methylimidazol-1-yl)phenyl]methanol
中文名称	(3-甲氧基-4-(4-甲基-1H-咪唑-1-基)苯基)甲醇
CAS 号	1017789-63-7
分子式	C ₁₂ H ₁₄ N ₂ O ₂
分子量	218.252
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

[3-甲氧基-4-(4-甲基-1H-咪唑-1-基)苯基]甲醇 (CAS 号: 1017789-63-7) 是一种具有明确结构的有机化合物, 分子式为 $C_{12}H_{14}N_2O_2$, 分子量为 218.252。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 兼具芳香醚和咪唑杂环的特性。其结构中甲氧基与咪唑基的协同作用赋予其独特的化学性质, 包括良好的溶解性 (溶于常见有机溶剂如 DMSO、甲醇) 和适度的极性, 适合作为中间体参与多种有机合成反应。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其苯甲醇骨架与咪唑环的共轭结构, 在生物活性分子设计中具有重要价值。咪唑基团可作为氢键受体或供体, 参与分子识别和酶抑制过程; 而甲氧基的引入可调节脂溶性和电子效应, 影响化合物的跨膜转运能力。其在药物化学中常用于构建激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂的核心片段, 尤其在抗炎和抗肿瘤先导化合物开发中展现出潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

作为关键中间体, 本产品主要应用于以下领域:

- (1) 医药研发: 用于合成靶向 EGFR、ALK 等酪氨酸激酶的小分子抑制剂;
- (2) 材料科学: 作为功能单体参与制备具有光电特性的高分子材料;
- (3) 农药化学: 衍生为杀菌剂或杀虫剂的活性组分;
- (4) 学术研究: 作为探针分子研究咪唑类化合物的构效关系。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、避光、干燥惰性气体 (如氮气) 环境下长期储存。开封后需充氮密封, 防止吸湿和氧化。使用前需恢复至室温并充分干燥, 称量应在干燥环境中快速完成。推荐工作浓度为 1-10 mM (DMSO 配制), 避免反复冻融。实验操作需在通风橱中进行, 与强氧化剂分开存放。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行严格质控，确保批次间一致性。安全数据表明：其急性毒性（LD50 大鼠口服）>500 mg/kg，属于低毒类物质，但仍需避免吸入粉尘或接触皮肤。如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应作为有害化学品处理，遵守当地环保法规。建议实验人员佩戴防护手套、护目镜和防尘口罩操作。