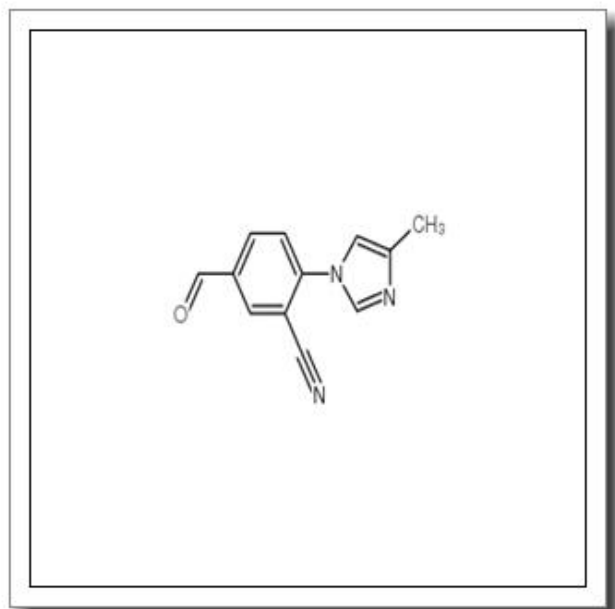


# 5-甲酰基-2-(4-甲基-1H-咪唑-1-基)-苯甲腈

*5-formyl-2-(4-methylimidazol-1-yl)benzonitrile*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	5-formyl-2-(4-methylimidazol-1-yl)benzonitrile
中文名称	5-甲酰基-2-(4-甲基-1H-咪唑-1-基)-苯甲腈
CAS 号	1170735-10-0
分子式	C <sub>12</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O
分子量	211.219
纯度	≥ 96%

## 产品说明

### 5-甲酰基-2-(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

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 5-formyl-2-(4-methylimidazol-1-yl)benzotrile，分子式 C<sub>12</sub>H<sub>9</sub>N<sub>3</sub>O，分子量 211.219，CAS 号 1170735-10-0。其结构中同时包含甲酰基、咪唑环和氰基官能团，赋予其独特的反应活性。纯度 ≥96% (HPLC 测定)，可溶于 DMSO、甲醇等有机溶剂，微溶于水。该化合物在常温下稳定，但需避光保存以避免甲酰基的光解反应。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为含咪唑环的芳香族衍生物，该分子在药物化学中具有重要价值。咪唑基团可作为金属离子配体或氢键受体，而甲酰基和氰基则提供了进一步功能化修饰的位点。其结构特征使其成为激酶抑制剂、抗菌剂等活性分子设计的核心骨架，尤其在靶向蛋白-蛋白相互作用的小分子开发中表现突出。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药研发：用于构建抗肿瘤、抗炎药物的先导化合物，特别是 JAK/STAT 信号通路抑制剂的合成。
- 3.2 材料科学：作为有机发光二极管 (OLED) 材料的前体，其共轭结构可调节光电性能。
- 3.3 化学合成：作为多官能团砌块，通过缩合、环加成等反应制备杂环化合物。

#### 4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存条件：密封保存于 -20℃ 至 4℃ 干燥环境中，惰性气体保护可延长稳定性。
- 4.2 使用建议：称取时避免吸湿，建议在手套箱或干燥环境下操作。配制溶液需现配现用，若需保存应充氮避光。

#### 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，残留溶剂符合 ICH Q3C 标

准。

5.2 安全警示：对眼睛和呼吸道有刺激性，操作时需佩戴护目镜和防尘口罩。皮肤接触后应立即用大量清水冲洗。废弃物应作为有害化学品处理，遵守当地环保法规。

本产品仅供科研用途，不适用于临床或食品领域。具体应用前请查阅最新文献并开展安全性评估。