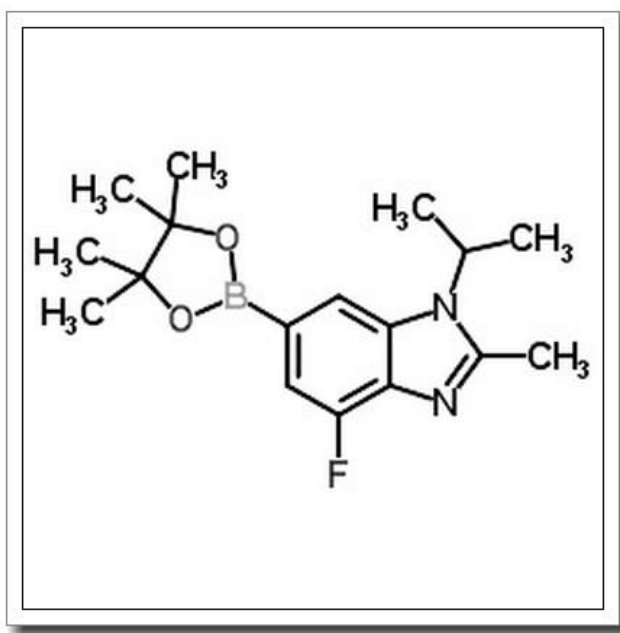


4-氟-2-甲基-1-(异丙基)-6-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧杂环己硼烷-2-基)-1H-苯并咪唑

4-fluoro-1-isopropyl-2-methyl-6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-benzo[d]imidazole



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-fluoro-1-isopropyl-2-methyl-6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-1H-benzo[d]imidazole
中文名称	4-氟-2-甲基-1-(异丙基)-6-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧杂环己硼烷-2-基)-1H-苯并咪唑
CAS 号	1231930-37-2
分子式	C17H24BFN2O2
分子量	318.194

纯度	>96%
----	------

产品说明

1. 产品概述与化学特性

4-氟-2-甲基-1-(异丙基)-6-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧杂环己硼烷-2-基)-1H-苯并咪唑 (CAS 号: 1231930-37-2) 是一种含硼杂环化合物, 分子式为 $C_{17}H_{24}BFN_2O_2$, 分子量为 318.194。该化合物以白色至类白色固体形式存在, 纯度高于 96%, 具有稳定的硼酸酯结构 (4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧杂环己硼烷基团), 同时含有苯并咪唑骨架和氟取代基, 赋予其独特的化学反应性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为硼酸酯衍生物, 在 Suzuki-Miyaura 偶联反应中表现出优异的反应活性, 可作为关键中间体用于构建碳-碳键。其苯并咪唑结构在药物化学中具有广泛的应用价值, 常用于设计激酶抑制剂或抗肿瘤药物。氟原子的引入可增强化合物的代谢稳定性和生物膜穿透性, 因此在药物研发中具有重要地位。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发和有机合成领域, 具体用途包括:

- 作为硼酸酯试剂, 用于合成靶向药物分子 (如 EGFR 抑制剂或 PARP 抑制剂);
- 在材料科学中用于构建含氟有机功能材料;
- 作为荧光探针或生物标记物的前体化合物。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、惰性气体 (如氩气) 保护下避光保存, 以延长 shelf life。使用前需恢复至室温并避免接触水分, 防止硼酸酯水解。溶解时推荐使用无水 THF 或 DMSO 等惰性溶剂, 反应体系中需严格除氧。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 和 NMR 确保纯度 $>96\%$, 批次间稳定性可控。安全注意事项:

- 穿戴防护手套和护目镜, 避免吸入粉尘或接触皮肤;
- 在通风橱中操作, 远离强氧化剂和酸;
- 废弃物需按危险化学品规范处理。

(注: 本说明基于现有化学数据编制, 具体应用需结合实验条件优化。)