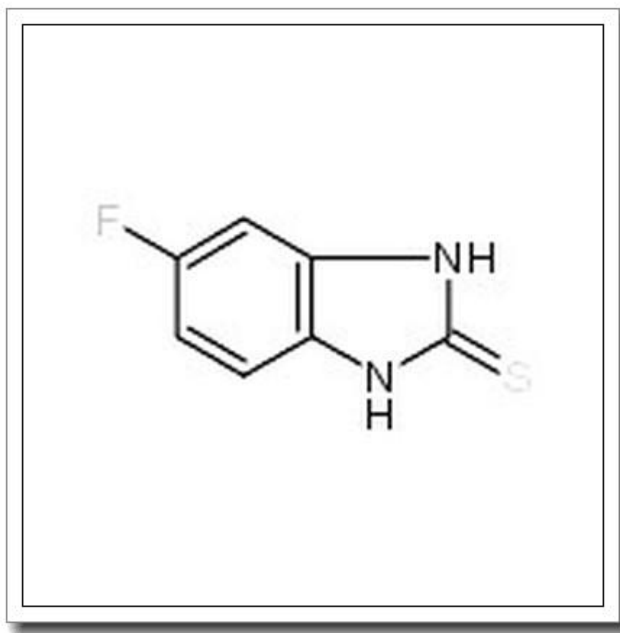


5-氟-1,3-二氢-2H-苯并咪唑-2-硫酮

5-fluoro-1,3-dihydrobenzimidazole-2-thione



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-fluoro-1,3-dihydrobenzimidazole-2-thione
中文名称	5-氟-1,3-二氢-2H-苯并咪唑-2-硫酮
CAS 号	583-42-6
分子式	C ₇ H ₅ FN ₂ S
分子量	168.191
纯度	>96%

产品说明

5-氟-1,3-二氢-2H-苯并咪唑-2-硫酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5-氟-1,3-二氢-2H-苯并咪唑-2-硫酮 (CAS 号: 583-42-6) 是一种含氟苯并咪唑类衍生物, 分子式为 $C_7H_5FN_2S$, 分子量 168.191。该化合物为白色至淡黄色结晶粉末, 纯度 >96%, 具有硫酮基团 ($-C=S$) 和氟原子的协同电子效应, 使其在有机合成中表现出独特的反应活性。其结构中苯并咪唑环与硫酮基团的共轭体系赋予其良好的热稳定性, 熔点范围为 210-215°C (分解), 微溶于水, 易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和 N,N-二甲基甲酰胺 (DMF)。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯并咪唑类化合物的氟代衍生物, 该分子可通过与生物体内酶或受体的相互作用, 干扰核酸或蛋白质功能。其硫酮基团可作为金属离子螯合位点, 而氟原子的强电负性可增强细胞膜穿透性, 在药物化学中常用于构建抗菌、抗肿瘤或抗病毒活性分子的核心骨架。研究表明, 该类结构对某些激酶和拓扑异构酶具有抑制潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本品是合成氟代苯并咪唑类药物的关键中间体, 可用于开发新型抗寄生虫剂 (如阿苯达唑类似物) 或酪氨酸激酶抑制剂。在材料科学中, 其作为配体可用于制备荧光探针或过渡金属配合物。此外, 在农用化学品研发中, 可作为杀菌剂或植物生长调节剂的结构模块。实验室中常用于杂环化合物构建及硫代酰胺化反应研究。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20°C 至 4°C 的干燥环境中, 避免光照及湿度 >60% 的条件。开封后需充惰性气体保护, 长期储存建议分装至琥珀玻璃瓶。使用时应在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解推荐使用预冷的 DMF, 浓度超过 10 mM 时需超声辅助溶解。与强氧化剂、重金属盐类分开存放。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，残留溶剂符合 USP 标准。MSDS 显示其急性毒性（LD50 大鼠口服）为 480 mg/kg，属于有害物质（GHS 分类：H302）。操作时需佩戴护目镜、丁腈手套及防尘口罩，接触后立即用大量清水冲洗。废弃物应作为危险有机氟化合物处置，禁止直接排入下水道。运输分类为 UN2811（6.1 类），需提供化学品安全技术说明书随货同行。

注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需根据实验方案调整。建议使用者查阅最新文献并开展小试实验验证适用性。