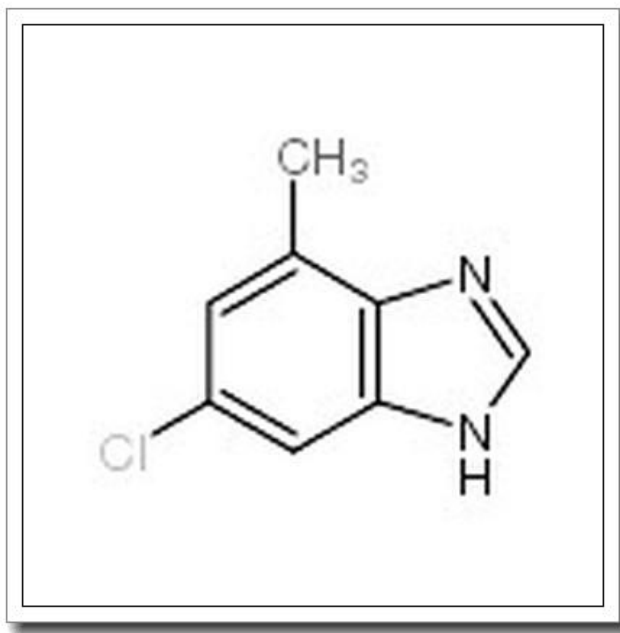


5-氯-7-甲基-1H-苯并咪唑

6-chloro-4-methyl-1H-benzimidazole



产品基本信息

属性	值
化学名称	6-chloro-4-methyl-1H-benzimidazole
中文名称	5-氯-7-甲基-1H-苯并咪唑
CAS 号	180508-09-2
分子式	C ₈ H ₇ ClN ₂
分子量	166.608
纯度	>96%

产品说明

5-氯-7-甲基-1H-苯并咪唑产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 6-chloro-4-methyl-1H-benzimidazole (CAS 180508-09-2)，是一种苯并咪唑类衍生物，分子式 C₈H₇ClN₂，分子量 166.608。其结构由苯环与咪唑环稠合而成，5 位氯原子和 7 位甲基的引入赋予其独特的电子效应和空间位阻特性。常温下为白色至类白色结晶粉末，纯度>96%，易溶于极性有机溶剂（如 DMSO、甲醇），微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯并咪唑类化合物的关键中间体，该分子具有显著的生物活性。其咪唑环可作为氢键供受体参与分子识别，而氯原子的强电负性可增强与靶标蛋白的相互作用。研究表明，此类结构在抑制酶活性（如激酶、拓扑异构酶）及干扰核酸代谢中表现突出，是开发抗肿瘤、抗寄生虫药物的优势骨架。

3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药研发：用于合成新型苯并咪唑类抗癌剂（如微管蛋白抑制剂）及抗 helminthic 药物前体。
- 3.2 材料科学：作为配体参与金属有机框架（MOFs）构建，或用于荧光探针的修饰基团。
- 3.3 农用化学品：衍生化后可制备高效低毒杀菌剂，作用于真菌细胞膜麦角甾醇合成通路。

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存：密封避光保存于-20℃至 4℃干燥环境中，惰性气体保护可延长稳定性。
- 4.2 溶解：推荐使用预冷 DMSO 配制母液（10-50 mM），避免反复冻融。
- 4.3 操作：需在通风橱中使用，接触皮肤后立即用大量清水冲洗 15 分钟。

5. 质量控制与安全信息

5.1 质检标准: HPLC 检测纯度 \geq 96%, 残留溶剂符合 ICH Q3C 指南。

5.2 安全数据: 急性毒性 (LD50 大鼠口服) $>$ 500 mg/kg, 属于刺激性物质 (GHS 分类: Eye Irrit. 2)。

5.3 废弃物处理: 按危险化学品处置, 不可直接排入下水道。

本产品仅供科研用途, 不适用于诊断或治疗。使用者应具备专业有机化学操作资质, 并查阅最新版 MSDS 获取详细防护措施。