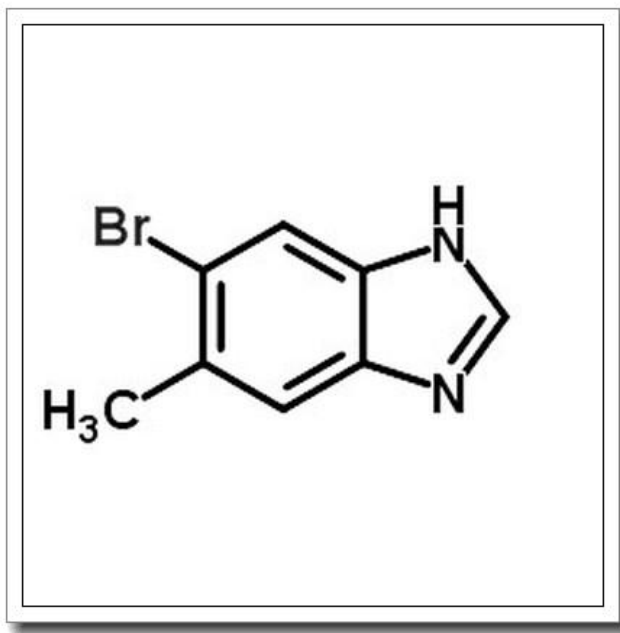


# 5-溴-6-甲基-1H-苯并咪唑

*5-Bromo-6-methyl-1H-benzo[d]imidazole*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	5-Bromo-6-methyl-1H-benzo[d]imidazole
中文名称	5-溴-6-甲基-1H-苯并咪唑
CAS 号	116106-16-2
分子式	C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> BrN <sub>2</sub>
分子量	211.059
纯度	>96%

## 产品说明

### 5-溴-6-甲基-1H-苯并咪唑产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

5-溴-6-甲基-1H-苯并咪唑 (CAS 号: 116106-16-2) 是一种苯并咪唑类衍生物, 分子式为  $C_8H_7BrN_2$ , 分子量为 211.059。该化合物为白色至浅黄色结晶粉末, 纯度高于 96%, 具有典型的芳香杂环结构, 其溴代和甲基取代基赋予其独特的反应活性与空间位阻效应。该物质易溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇和乙腈, 但在水中溶解度较低, 需注意避光保存以避免光解反应。

#### 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, 5-溴-6-甲基-1H-苯并咪唑在药物化学和材料科学中具有重要价值。其结构中的咪唑环可作为氢键供体或受体, 参与分子间相互作用, 而溴原子则为后续偶联反应 (如 Suzuki 偶联) 提供活性位点。该化合物常用于构建抗肿瘤、抗病毒药物的核心骨架, 尤其在激酶抑制剂和 DNA 嵌入剂的设计中表现突出。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本产品主要用于合成小分子靶向药物, 特别是用于修饰酪氨酸激酶抑制剂的母核结构。在材料科学中, 可作为有机发光二极管 (OLED) 的中间体或配体前体。此外, 其衍生物在农用化学品 (如杀菌剂) 和荧光探针的合成中亦有应用。实验研究显示, 该化合物对某些癌细胞的增殖抑制活性显著, 需进一步开展构效关系研究。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在  $-20^{\circ}C$ 、干燥惰性气体 (如氩气) 保护下长期储存, 短期使用可置于  $2-8^{\circ}C$  避光环境。开封后需充氮密封, 避免吸湿和氧化。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套及护目镜。溶解推荐使用无水 DMSO, 配制溶液建议现配现用, 长期存放可能导致降解。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，重金属含量符合 ACS 标准。安全数据表明，其急性毒性（LD50）为大鼠经口 $>500$  mg/kg，但可能对眼睛和皮肤产生刺激性。操作时应避免吸入粉尘，若接触皮肤需立即用大量清水冲洗。废弃物处理需遵循危险化学品处置规范，不可直接排入下水道。

注：以上信息基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件优化。更多技术参数可联系我司技术支持部门获取。