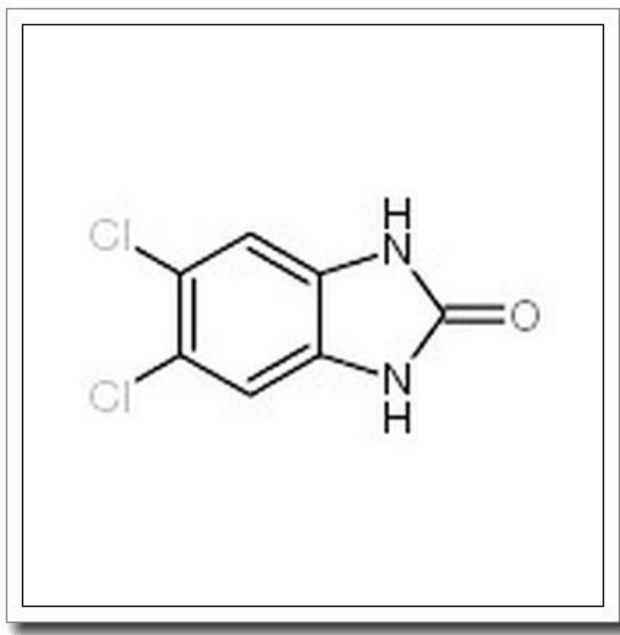


5,6-二氯-1H-苯并[d]咪唑-2(3H)-酮

5, 6-Dichloro-1H-benzo[d]imidazol-2(3H)-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	5, 6-Dichloro-1H-benzo[d]imidazol-2(3H)-one
中文名称	5, 6-二氯-1H-苯并[d]咪唑-2(3H)-酮
CAS 号	2033-29-6
分子式	C ₇ H ₄ Cl ₂ N ₂ O
分子量	203.025
纯度	>96%

产品说明

5,6-二氯-1H-苯并[d]咪唑-2(3H)-酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

5,6-二氯-1H-苯并[d]咪唑-2(3H)-酮 (CAS 号 2033-29-6) 是一种含氯杂环化合物, 分子式为 $C_7H_4Cl_2N_2O$, 分子量 203.025。该化合物为白色至类白色结晶粉末, 纯度 >96%, 具有咪唑酮类结构的典型特性, 包括良好的热稳定性和适度的极性溶解性 (可溶于 DMSO、DMF 等有机溶剂)。其结构中 5,6 位的氯取代基赋予分子较高的反应活性, 可作为有机合成中间体或生物活性分子的核心骨架。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯并咪唑衍生物, 该化合物在生物化学领域表现出显著的杂环配体特性, 能够与金属离子或生物大分子 (如酶、DNA) 发生相互作用。其结构中的氯原子和咪唑酮环共同参与电子传递和氢键形成, 使其在药物化学中成为设计激酶抑制剂或抗菌剂的潜在药效团。此外, 该分子在材料科学中可用于构建功能化聚合物或荧光探针。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发中, 本品常用于合成抗肿瘤或抗病毒先导化合物, 特别是针对 DNA 拓扑异构酶的抑制剂开发。工业领域可作为光敏材料或防腐剂的合成前体。实验室中主要用于有机方法学研究, 如过渡金属催化偶联反应或杂环化合物的官能团化修饰。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 的干燥环境中, 避免光照和潮湿。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时应佩戴防护手套、护目镜, 并在通风橱中操作。溶解时优先选用无水 DMSO, 配制溶液建议现配现用, 长期储存可能导致水解或聚合。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 >96%, 残留溶剂符合 USP 标准。MSDS 显示其属于刺激性化学品 (GHS 分类: 皮肤刺激 2 类), 接触后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，禁止直接排放至下水道。运输时按一般化学品分类，但需避免与强氧化剂共存。

注：以上数据基于当前研究结果，具体应用需结合实验条件验证。