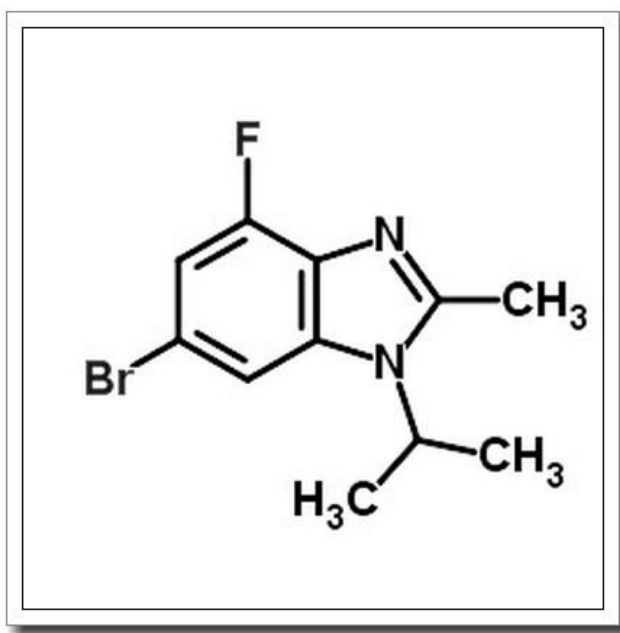


6-溴-4-氟-1-异丙基-2-甲基-1H-苯并[d]咪唑

6-Bromo-4-fluoro-1-isopropyl-2-methyl-1H-benzo[d]imidazole



产品基本信息

属性	值
化学名称	6-Bromo-4-fluoro-1-isopropyl-2-methyl-1H-benzo[d]imidazole
中文名称	6-溴-4-氟-1-异丙基-2-甲基-1H-苯并[d]咪唑
CAS 号	1231930-33-8
分子式	C ₁₁ H ₁₂ BrFN ₂
分子量	271.129
纯度	>96%

产品说明

6-溴-4-氟-1-异丙基-2-甲基-1H-苯并[d]咪唑产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶粉末，化学名称为 6-溴-4-氟-1-异丙基-2-甲基-1H-苯并[d]咪唑，CAS 号为 1231930-33-8，分子式 C₁₁H₁₂BrFN₂，分子量 271.129。其结构中含溴、氟取代基及异丙基侧链，赋予分子独特的电子效应和空间位阻特性。该化合物在常温下稳定，易溶于二甲基亚砜（DMSO）、甲醇等有机溶剂，微溶于水（<0.1 mg/mL，25℃）。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，符合生化试剂标准。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯并咪唑类衍生物，该分子可通过其咪唑环氮原子与生物大分子形成氢键，溴原子增强疏水性，氟原子调节电子云分布，使其成为药物化学中重要的结构模块。其特异性结构可靶向蛋白激酶 ATP 结合位点，在抑制剂设计中具有关键作用。异丙基和甲基的引入显著改善了化合物的代谢稳定性。

3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药研发：用于激酶抑制剂先导化合物优化，特别是在抗癌药物开发中作为 JAK2、CDK 等靶点的候选结构
- 3.2 材料科学：作为有机发光二极管（OLED）材料的前体化合物
- 3.3 化学生物学：用于蛋白质标记和生物共轭反应的活性中间体
- 3.4 农用化学品：新型杀菌剂和杀虫剂的合成砌块

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存：密封保存于-20℃干燥环境中，避免光照和湿度。长期储存建议充氮保护。
- 4.2 溶解性：推荐使用前以 DMSO 配制成 10-50 mM 母液，分装后-80℃保存，避免反复冻融。
- 4.3 操作：应在通风橱中使用，佩戴防护手套和护目镜。与强氧化剂分开存放。

5. 质量控制与安全信息

5.1 质检标准：通过 ^1H NMR、 ^{13}C NMR 和 LC-MS 进行结构确证，HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ 。

5.2 安全数据：根据 GHS 分类，该产品可能造成皮肤刺激（类别 2）和眼刺激（类别 2A）。

5.3 应急处理：接触皮肤时立即用大量清水冲洗 15 分钟；吸入时应转移至空气新鲜处。

5.4 废弃物处置：按危险化学品处理，交由专业机构焚烧处理。

本产品仅供科研使用，不适用于诊断或治疗用途。建议使用前查阅最新版物质安全数据表（MSDS）并开展风险评估。