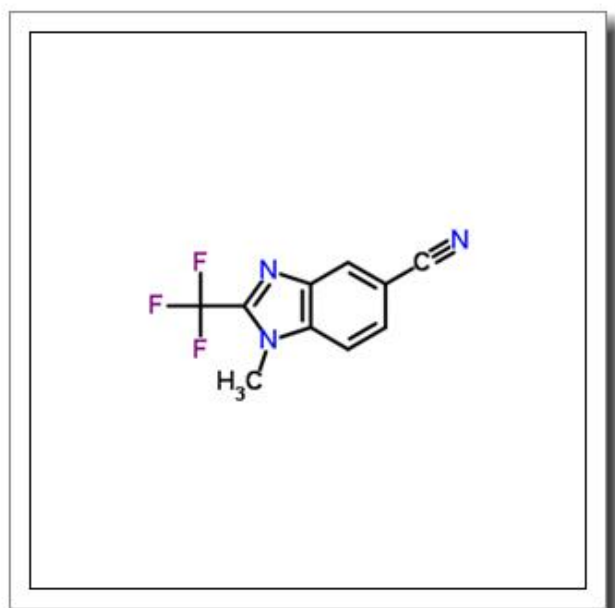


1-Methyl-2-(trifluoromethyl)-1H-benzimidazole-5-carbonitrile

1-Methyl-2-(trifluoromethyl)-1H-benzimidazole-5-carbonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-Methyl-2-(trifluoromethyl)-1H-benzimidazole-5-carbonitrile
中文名称	1-Methyl-2-(trifluoromethyl)-1H-benzimidazole-5-carbonitrile
CAS 号	1506412-07-2
分子式	C10H6F3N3
分子量	
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-Methyl-2-(trifluoromethyl)-1H-benzimidazole-5-carbonitrile (CAS 号: 1506412-07-2) 是一种含氟苯并咪唑类衍生物, 分子式为 C₁₀H₆F₃N₃。该化合物具有苯并咪唑核心结构, 并在 1 位和 2 位分别引入甲基和三氟甲基取代基, 5 位为氰基修饰。其分子量可通过分子式计算得出, 纯度标准为 $\geq 96\%$ 。该物质通常表现为白色至类白色结晶或粉末, 具有较高的化学稳定性和疏水性, 适合作为有机合成中间体或生物活性分子研究的基础材料。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯并咪唑类化合物, 该分子因其独特的电子效应和空间位阻, 在药物化学和材料科学中具有重要价值。三氟甲基和氰基的引入可显著调节分子的脂溶性和电子密度, 可能影响其与生物靶点的相互作用。此类结构常见于抗肿瘤、抗病毒或激酶抑制剂类药物的研发中, 尤其在优化药物代谢动力学性质 (如代谢稳定性和细胞渗透性) 方面表现突出。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药和农药领域的创新研发。在医药方向, 可作为激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂的合成前体; 在农药领域, 可能用于开发高效低毒的杀菌剂或杀虫剂。此外, 其含氟特性也使其在材料科学 (如液晶材料或有机电子器件) 中具有潜在应用价值。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、避光环境中, 温度控制在 2-8°C 以延长稳定性。开封后需充惰性气体 (如氮气) 保护, 避免吸湿或氧化。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解性测试推荐使用二甲亚砜 (DMSO) 或二氯甲烷等有机溶剂, 并注意相容性实验。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确保纯度 $\geq 96\%$, 批次间提供 COA (质量分析证书)。安全数

据表明，该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性，操作时需佩戴防护手套和护目镜。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地法规，建议通过专业化学品回收机构处置。

（注：分子量未提供，需根据实际计算补充；具体生物活性需结合实验数据进一步验证。）