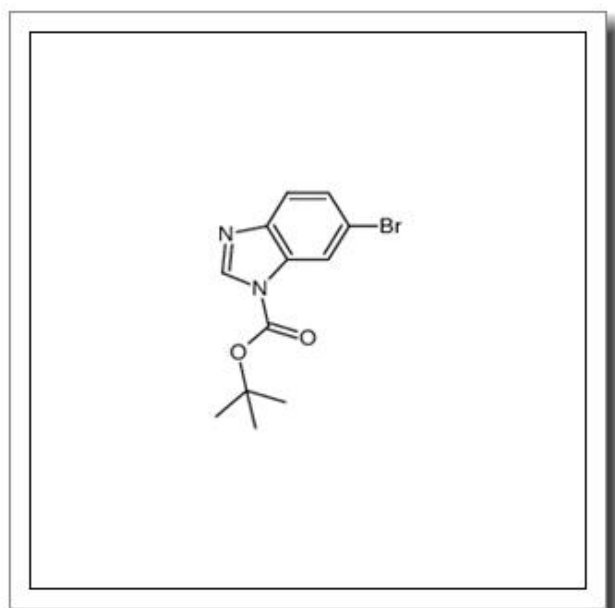


1,1-dimethylethyl 6-bromo-1H-benzimidazole-1-carboxylate

1,1-dimethylethyl 6-bromo-1H-benzimidazole-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	1,1-dimethylethyl 6-bromo-1H-benzimidazole-1-carboxylate
中文名称	1,1-dimethylethyl 6-bromo-1H-benzimidazole-1-carboxylate
CAS 号	1006899-77-9
分子式	C ₁₂ H ₁₃ BrN ₂ O ₂
分子量	297.148
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1,1-dimethylethyl 6-bromo-1H-benzimidazole-1-carboxylate (CAS 号: 1006899-77-9) 是一种高纯度有机化合物, 分子式为 $C_{12}H_{13}BrN_2O_2$, 分子量为 297.148。该化合物属于苯并咪唑类衍生物, 具有溴取代基和叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团, 结构稳定, 纯度 $\geq 96\%$ 。其白色至类白色结晶粉末形态, 易溶于常见有机溶剂 (如 DMSO、DMF), 但在水中溶解度较低。

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, 该分子在药物化学和材料科学中具有重要价值。溴取代基提供了进一步官能团化的活性位点, 而 Boc 保护基团可选择性脱除, 便于后续合成修饰。其结构特性使其成为构建抗癌、抗病毒药物及功能材料的核心骨架, 尤其在激酶抑制剂和核苷类似物的研发中应用广泛。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发和有机合成领域。在药物开发中, 可作为合成 Bruton 酪氨酸激酶 (BTK) 抑制剂的中间体, 或用于构建抗肿瘤化合物库。此外, 在材料科学中, 可用于制备荧光探针或配位聚合物。实验室级应用包括作为标准品用于 HPLC 或质谱分析, 以及作为教学实验中的高级合成模板。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下避光密封保存, 长期储存需充入惰性气体 (如氮气) 以保持稳定性。开封后应尽快使用, 避免反复冻融。使用时需在干燥惰性气氛 (如氩气手套箱) 中操作, 溶解推荐使用无水级溶剂。实验人员需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩, 防止吸入或皮肤接触。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行严格质量控制, 确保批次间一致性。安全数据表明, 该化合物可能对眼睛、呼吸系统和皮肤有刺激性, 操作时应遵守 GHS 标准, 标

识代码为 H315-H319-H335。废弃物需按危险化学品规范处置，避免与强氧化剂接触。提供详细 MSDS 报告备查，紧急情况可用大量清水冲洗接触部位并立即就医。