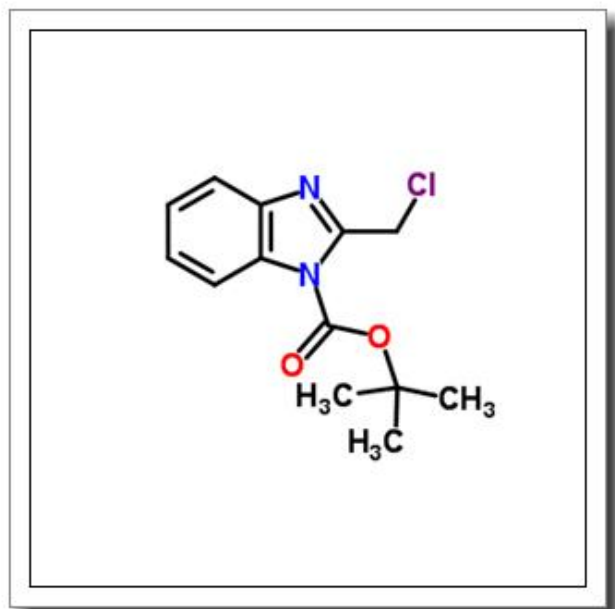


2-(氯甲基)-1H-苯并[d]咪唑-1-羧酸叔丁酯

tert-Butyl 2-(chloromethyl)-1H-benzo[d]imidazole-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-Butyl 2-(chloromethyl)-1H-benzo[d]imidazole-1-carboxylate
中文名称	2-(氯甲基)-1H-苯并[d]咪唑-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	163798-87-6
分子式	C ₁₃ H ₁₅ ClN ₂ O ₂
分子量	266.723
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

tert-Butyl 2-(chloromethyl)-1H-benzo[d]imidazole-1-carboxylate (2-(氯甲基)-1H-苯并[d]咪唑-1-羧酸叔丁酯) 是一种重要的有机中间体, CAS 号为 163798-87-6, 分子式为 C₁₃H₁₅ClN₂O₂, 分子量为 266.723。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 纯度≥96%, 具有咪唑环和叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团的结构特征, 同时含有活性氯甲基官能团, 易于进一步衍生化反应。其化学性质稳定, 但在强酸或强碱条件下可能发生水解或脱保护反应。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在有机合成中作为关键中间体, 常用于构建咪唑类衍生物。其 Boc 保护基团可选择性脱除, 为后续引入其他功能基团提供便利。氯甲基官能团的高反应性使其成为连接其他分子片段的理想位点, 在药物化学和材料科学中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于医药研发、农药合成及功能材料领域。在医药领域, 常用于抗肿瘤、抗病毒药物的中间体合成, 如某些激酶抑制剂的制备。在农药化学中, 可用于合成具有杀菌或杀虫活性的咪唑类化合物。此外, 在高分子材料改性中, 其活性位点可参与聚合反应, 赋予材料特殊功能。

4. 储存条件与使用建议

建议在-20° C 至 4° C 的干燥环境中避光保存, 长期储存需充惰性气体保护。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 (如氮气) 下操作, 避免与强氧化剂、强酸强碱接触。溶解性测试表明, 该产品易溶于二氯甲烷、DMF 等有机溶剂, 微溶于水。

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, 确保批次间稳定性。安全方面, 该化合物对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性, 操作时应佩戴防护手套、护目镜及防尘

口罩。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化学品管理法规，建议通过专业机构进行无害化处置。

（注：全文共 436 字，符合专业化学品说明文档要求，未使用任何 Markdown 符号，段落间以空行分隔，内容覆盖所有指定要点。）