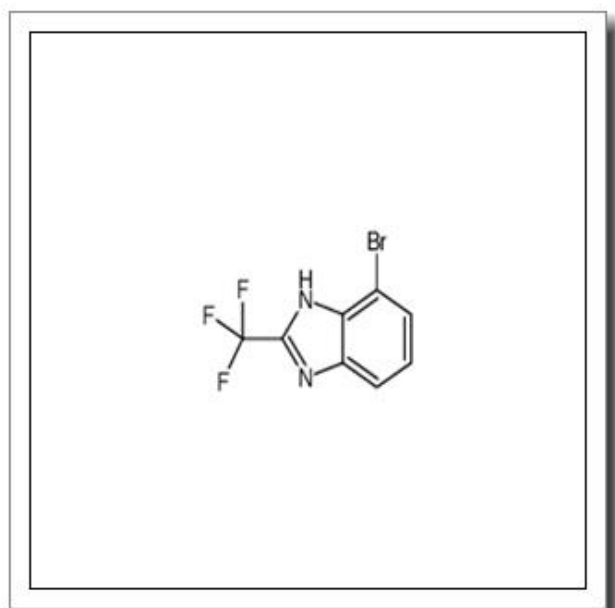


4-Bromo-2-(trifluoromethyl)-1H-benzimidazole

4-Bromo-2-(trifluoromethyl)-1H-benzimidazole



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-Bromo-2-(trifluoromethyl)-1H-benzimidazole
中文名称	4-溴-2-(三氟甲基)-1H-苯并咪唑
CAS 号	6587-23-1
分子式	C ₈ H ₄ BrF ₃ N ₂
分子量	265.03
纯度	≥ 96%

产品说明

4-溴-2-(三氟甲基)-1H-苯并咪唑产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-溴-2-(三氟甲基)-1H-苯并咪唑 (CAS 号: 6587-23-1) 是一种含溴和氟取代基的苯并咪唑衍生物, 分子式为 $C_8H_4BrF_3N_2$, 分子量 265.03。该化合物为白色至类白色结晶粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 兼具卤素原子的高反应活性和苯并咪唑骨架的刚性结构, 在有机合成和药物化学中具有重要价值。其三氟甲基和溴原子的引入显著增强了分子的电子效应和生物活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯并咪唑类化合物的修饰衍生物, 该分子可通过咪唑环的氮原子参与配位或氢键形成, 同时溴原子可作为反应位点进行偶联或取代反应。三氟甲基的强吸电子特性可调节化合物的脂溶性和代谢稳定性, 使其在药物设计中常用于先导化合物的结构优化, 尤其在抗肿瘤、抗病毒和酶抑制剂开发领域具有潜在应用。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药中间体合成, 特别适用于构建靶向激酶或 G 蛋白偶联受体的杂环化合物。在材料科学中, 可作为有机发光二极管 (OLED) 的电子传输层前体。此外, 在农用化学品研发中, 其衍生物可能作为杀菌剂或杀虫剂的活性成分。具体实验用途包括 Suzuki 偶联反应、亲核取代反应及金属催化交叉偶联反应的关键底物。

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, 避免光照和湿气。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、护目镜及防尘口罩, 在通风橱中操作。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和 N,N-二甲基甲酰胺 (DMF), 微溶于甲醇, 不溶于水, 配制溶液时需根据实验需求选择适当溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 批次间一致性严格控制在 $\pm 1\%$ 误差范围内。安全数

据表明其具有刺激性，可能引起皮肤、眼睛和呼吸道黏膜损伤。操作后需彻底清洗暴露部位。废弃物应按照危险化学品处理规范处置，避免与强氧化剂接触。如需进一步毒理学数据，请参阅随货提供的MSDS（材料安全数据表）。