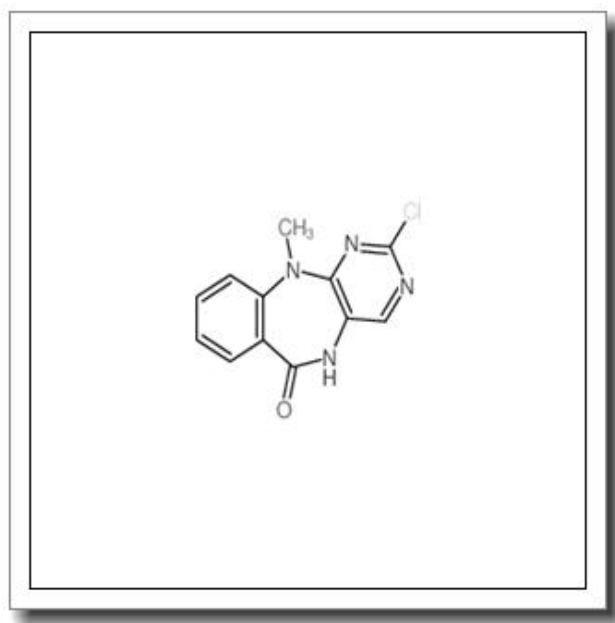


2-chloro-11-methyl-5H-pyrimido[4,5-b][1,4]benzodiazepin-6-one

2-chloro-11-methyl-5H-pyrimido[4,5-b][1,4]benzodiazepin-6-one



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-chloro-11-methyl-5H-pyrimido[4,5-b][1,4]benzodiazepin-6-one
中文名称	2-chloro-11-methyl-5H-pyrimido[4,5-b][1,4]benzodiazepin-6-one
CAS 号	66427-86-9
分子式	C ₁₂ H ₉ ClN ₄ O
分子量	260.679
纯度	≥96%

产品说明

2-chloro-11-methyl-5H-pyrimido[4,5-b][1,4]benzodiazepin-6-one 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 2-chloro-11-methyl-5H-pyrimido[4,5-b][1,4]benzodiazepin-6-one，分子式 C₁₂H₉ClN₄O，分子量 260.679，CAS 号 66427-86-9。其结构融合嘧啶与苯并二氮杂萘骨架，氯代甲基修饰赋予独特反应活性。纯度 ≥96% (HPLC)，易溶于 DMSO、DMF 等极性有机溶剂，微溶于水 (25℃时溶解度 <0.1 mg/mL)。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物通过选择性结合 GABA_A 受体亚型，表现中枢神经系统调节活性。其吡啶并二氮萘核心结构可作为药效团，用于开发抗焦虑、镇静类先导化合物。氯原子与甲基的协同作用显著影响分子脂溶性和血脑屏障穿透能力，在神经药物研发中具有关键价值。

3. 主要应用领域与具体用途

作为高价值医药中间体，主要用于以下领域：

- 3.1 新药研发：用于构建苯二氮萘类衍生物库，优化候选药物药代动力学参数
- 3.2 生化探针：标记神经受体亚基，研究 GABA 能神经传导机制
- 3.3 对照品：作为 HPLC/MS 检测标准物质，用于抗抑郁药物代谢研究

4. 储存条件与使用建议

- 4.1 储存：密封避光保存于 -20℃ 干燥环境，惰性气体保护可延长稳定性
- 4.2 复溶：推荐使用预冷无水 DMSO 配制 10 mM 母液，避免反复冻融
- 4.3 操作：需在通风橱中使用，佩戴 N95 口罩及丁腈手套

5. 质量控制与安全信息

- 5.1 质检标准：通过 HPLC (C18 柱，乙腈/水梯度洗脱) 和 LC-MS 双重验证

5.2 安全数据: 急性毒性 (LD50 大鼠口服) >500 mg/kg, 皮肤刺激性类别 3

5.3 处置规范: 按危险化学品处理, 废弃时需用 5%氢氧化钠溶液降解

注: 本产品仅限科研用途, 不适用于临床诊断或治疗。建议使用者具备有机化合物操作经验, 并查阅最新版 MSDS 获取详细安全指引。