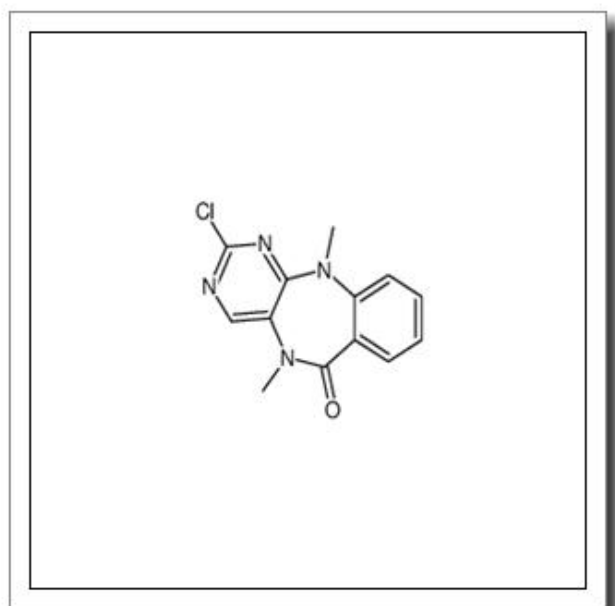


2-chloro-5,11-dimethyl-pyrimido[4,5-b][1,4]benzodiazepin-6-one

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



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-chloro-5, 11-dimethyl-pyrimido[4, 5-b][1, 4]benzodiazepin-6-one
中文名称	2-chloro-5, 11-dimethyl-pyrimido[4, 5-b][1, 4]benzodiazepin-6-one
CAS 号	1234479-75-4
分子式	C ₁₃ H ₁₁ ClN ₄ O
分子量	274. 706
纯度	≥ 96%

产品说明

2-chloro-5, 11-dimethyl-pyrimido[4, 5-b][1, 4]benzodiazepin-6-one 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为吡啶并苯二氮草类衍生物，化学名称 2-chloro-5, 11-dimethyl-pyrimido[4, 5-b][1, 4]benzodiazepin-6-one，CAS 号 1234479-75-4，分子式 C₁₃H₁₁ClN₄O，分子量 274.706。外观通常为白色至类白色结晶粉末，纯度 ≥96%。其结构融合了嘧啶环与苯二氮草骨架，氯原子和甲基的引入显著影响其电子分布和生物活性，使其在有机合成和药物研发中具有独特价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物通过特异性结合某些蛋白靶点（如 GABA 受体或激酶家族），可调控细胞信号通路。其核心结构苯二氮草衍生物表现出潜在的镇静、抗焦虑或抗肿瘤活性，而嘧啶环的修饰进一步增强了其代谢稳定性和靶向性。在药物化学中，此类结构常作为先导化合物用于神经退行性疾病或癌症治疗剂的开发。

3. 主要应用领域与具体用途

作为关键中间体，本产品广泛应用于以下领域：

- 医药研发：用于构建小分子抑制剂或调节剂，尤其在中枢神经系统药物和抗肿瘤药物筛选中具有潜力。
- 生化研究：作为探针分子，用于研究苯二氮草类化合物的构效关系或酶抑制机制。
- 有机合成：作为复杂杂环化合物的构建模块，参与多步合成反应。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C、避光、干燥条件下密封保存，长期储存需充入惰性气体。使用时需在干燥环境中操作，避免与强氧化剂或酸碱接触。溶解性测试表明其易溶于 DMSO、DMF 等极性有机溶剂，水溶性较低，建议预先配制储备液后稀释使用。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 验证纯度 $\geq 96\%$ ，MS 和 NMR 确证结构。安全数据表明，其具有刺激性，操作时需穿戴防护装备（手套、护目镜及防尘口罩），避免吸入或皮肤接触。如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地危险化学品法规。

（注：本说明基于现有研究数据，实际应用前请查阅最新文献并开展安全性评估。）