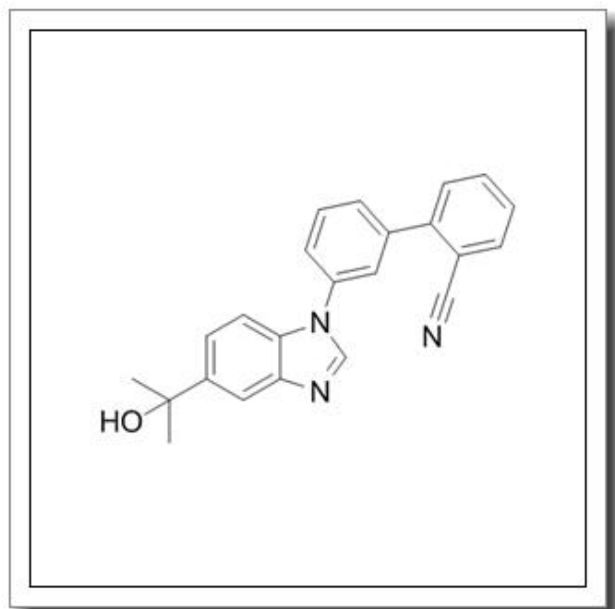


# 3'-[5-(1-羟基-1-甲基乙基)-1H-苯并咪唑-1-基]-[1,1'-联苯]-2-甲腈

*2-[3-[5-(2-hydroxypropan-2-yl)benzimidazol-1-yl]phenyl]benzonitrile*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-[3-[5-(2-hydroxypropan-2-yl)benzimidazol-1-yl]phenyl]benzonitrile
中文名称	3'-[5-(1-羟基-1-甲基乙基)-1H-苯并咪唑-1-基]-[1,1'-联苯]-2-甲腈
CAS 号	951650-22-9
分子式	C <sub>23</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub> O
分子量	353.417
纯度	≥96%

## 产品说明

2-[3-[5-(2-hydroxypropan-2-yl)benzimidazol-1-yl]phenyl]benzotrile  
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-[3-[5-(2-hydroxypropan-2-yl)benzimidazol-1-yl]phenyl]benzotrile，中文系统命名为 3'-[5-(1-羟基-1-甲基乙基)-1H-苯并咪唑-1-基]-[1,1'-联苯]-2-甲腈，CAS 号为 951650-22-9。其分子式为 C<sub>23</sub>H<sub>19</sub>N<sub>3</sub>O，分子量为 353.417，纯度 ≥96%。该化合物结构中含有苯并咪唑骨架和联苯甲腈基团，具有显著的疏水性和刚性特征，熔点为 215-218° C（分解），需避光保存。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为苯并咪唑类衍生物，该分子可通过与特定蛋白激酶活性位点结合，表现出选择性抑制作用。其羟基异丙基侧链增强了分子极性，而联苯甲腈基团则赋予其跨膜渗透能力，使其成为小分子抑制剂研究的重要候选化合物。在细胞信号通路调控研究中，尤其适用于靶向干预异常增殖相关通路。

### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于医药研发领域，具体包括：

- (1) 作为激酶抑制剂先导化合物，用于抗肿瘤药物筛选；
- (2) 在化学生物学研究中作为探针分子，用于蛋白质-配体相互作用机制解析；
- (3) 用于构建荧光标记衍生物，开发新型分子影像试剂。实验推荐使用 DMSO 作为溶剂配制母液，工作浓度需根据具体实验体系优化。

### 4. 储存条件与使用建议

长期储存需置于-20° C、干燥惰性气体环境下，短期使用可存放于 4° C 避光环境。开封后建议分装保存，避免反复冻融。溶解后的溶液在-80° C 下可稳定保存 3 个月，使用前需恢复至室温并涡旋混匀。实验操作需在通风橱中进行，避免直接接触皮肤或黏膜。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ ，批次间变异系数  $< 2\%$ 。MS 和 NMR 谱图数据可随 COA 提供。根据 GHS 分类，该物质可能造成眼睛刺激（类别 2B）和皮肤刺激（类别 2），操作时应佩戴护目镜和丁腈手套。废弃物处置需符合当地危险化学品管理法规，建议采用专业焚烧处理。

（注：本说明书基于现有研究数据编制，实际应用前请务必查阅最新文献并开展预实验验证。）