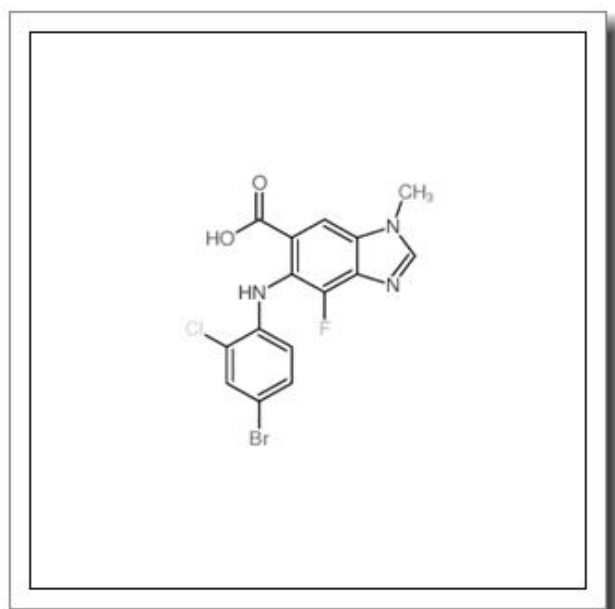


# 5-((4-溴-2-氯苯基)氨基)-4-氟-1-甲基-1H-苯并[d]咪唑-6-羧酸

*6-(4-bromo-2-chloroanilino)-7-fluoro-3-methylbenzimidazole-5-carboxylic acid*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	6-(4-bromo-2-chloroanilino)-7-fluoro-3-methylbenzimidazole-5-carboxylic acid
中文名称	5-((4-溴-2-氯苯基)氨基)-4-氟-1-甲基-1H-苯并[d]咪唑-6-羧酸
CAS 号	606144-04-1
分子式	C <sub>15</sub> H <sub>10</sub> BrClFN <sub>3</sub> O <sub>2</sub>
分子量	398.614
纯度	≥96%

## 产品说明

### 5-((4-溴-2-氯苯基)氨基)-4-氟-1-甲基-1H-苯并[d]咪唑-6-羧酸产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品为高纯度苯并咪唑类衍生物，化学名称为 6-(4-溴-2-氯苯胺基)-7-氟-3-甲基苯并咪唑-5-羧酸，CAS 号 606144-04-1，分子式 C<sub>15</sub>H<sub>10</sub>BrClFN<sub>3</sub>O<sub>2</sub>，分子量 398.614。其结构包含溴代芳环、氟取代基及羧酸官能团，赋予其独特的电子效应和分子识别能力。常温下为白色至类白色结晶粉末，纯度 ≥96% (HPLC)，可溶于 DMSO、DMF 等极性有机溶剂，微溶于甲醇，不溶于水。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为苯并咪唑骨架的修饰物，可通过抑制特定激酶活性干扰细胞信号转导，在分子生物学研究中具有工具化合物价值。其结构中的卤素原子（溴、氯、氟）增强了与靶蛋白的疏水相互作用，而羧酸基团提供了进一步结构修饰的位点，是开发蛋白酶抑制剂或荧光探针的重要中间体。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

- 3.1 医药研发：用于激酶抑制剂类抗肿瘤药物的先导化合物优化
- 3.2 化学生物学：作为蛋白标记探针的合成前体，研究蛋白质-小分子相互作用机制
- 3.3 材料科学：参与构建有机发光二极管 (OLED) 的电子传输层材料

#### 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，惰性气体保护下可延长稳定性
- 4.2 溶解：建议先用 DMSO 配制成 10-50mM 母液，使用时用缓冲液稀释至工作浓度
- 4.3 操作：需在通风橱中佩戴防化手套及护目镜，避免吸入粉尘或接触皮肤

#### 5. 质量控制与安全信息

- 5.1 质检标准：通过 HPLC、NMR 及质谱三重验证，批次间保留时间偏差 ≤0.5%
- 5.2 安全警示：GHS 分类为急性毒性（口服类别 4）、皮肤刺激性（类别 2），操

作后需彻底清洗暴露部位

5.3 废弃物处理：按危险有机卤化物处置，禁止直接排入下水道

本产品仅限科研用途，不适用于诊断或治疗应用。使用者应具备有机化合物操作资质并查阅最新版 MSDS 获取详细安全数据。