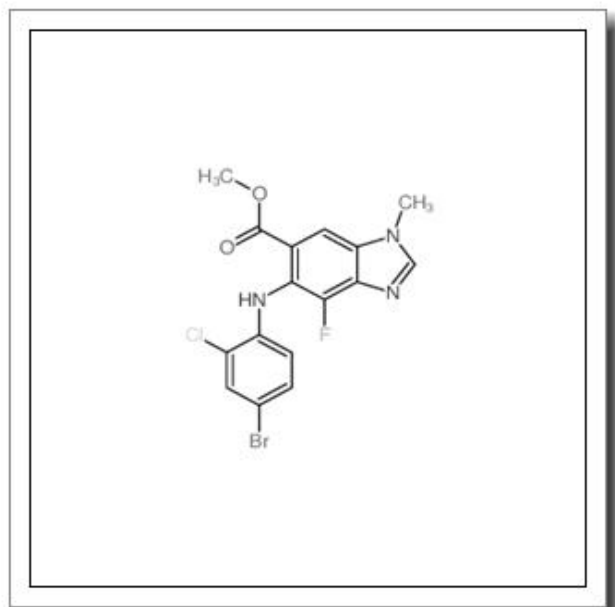


5-((4-溴-2-氯苯基)氨基)-4-氟-1-甲基-1H-苯并[d]咪唑-6-羧酸甲酯

Methyl 5-((4-bromo-2-chlorophenyl)amino)-4-fluoro-1-methyl-1H-benzo[d]imidazole-6-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 5-((4-bromo-2-chlorophenyl)amino)-4-fluoro-1-methyl-1H-benzo[d]imidazole-6-carboxylate
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-羧酸甲酯
CAS 号	606144-02-9
分子式	C ₁₆ H ₁₂ BrClFN ₃ O ₂
分子量	412.641
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-羧酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为高纯度有机化合物，化学名称为 Methyl 5-((4-bromo-2-chlorophenyl)amino)-4-fluoro-1-methyl-1H-benzo[d]imidazole-6-carboxylate，中文名参见标题。其 CAS 号为 606144-02-9，分子式为 C₁₆H₁₂BrClFN₃O₂，分子量为 412.641。该化合物为白色至类白色结晶性粉末，纯度 ≥96%，具有明确的苯并咪唑骨架结构，含溴、氯、氟等卤素取代基及甲酯羧酸官能团，表现出独特的电子效应和空间位阻特性。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯并咪唑类衍生物，该化合物可通过干扰 DNA 复制或酶活性发挥生物效应。其结构中的卤素原子 (Br、Cl、F) 可增强脂溶性与靶标结合能力，而甲酯基团则影响代谢稳定性。此类结构常见于抗癌、抗病毒或激酶抑制剂研究中，是药物先导化合物优化的重要中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发领域，具体包括：1) 作为小分子抑制剂的核心骨架，用于设计靶向肿瘤信号通路的候选药物；2) 在农药化学中用于新型杀菌剂的合成；3) 作为荧光标记物或探针的修饰基团。其应用需结合具体实验方案，如偶联反应或结构修饰。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃、避光、干燥的惰性气体环境中，长期保存建议充氩密封。使用前需恢复至室温并避免反复冻融。溶解性测试表明其易溶于 DMSO、DMF 等极性有机溶剂，水溶性较差。实验操作需在通风橱中进行，建议佩戴防护手套及护目镜。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%，批次间差异控制在 ±1% 以内。MS 与 NMR 数据可提

供验证。安全信息提示：该化合物可能对眼睛、皮肤及呼吸系统产生刺激，CAS 号 606144-02-9 未列入危险化学品目录，但仍需按一般有害化学品处理。废弃物处置应遵守当地环保法规。

注：以上信息基于现有研究数据，实际应用前请查阅最新文献并开展小规模预实验验证。