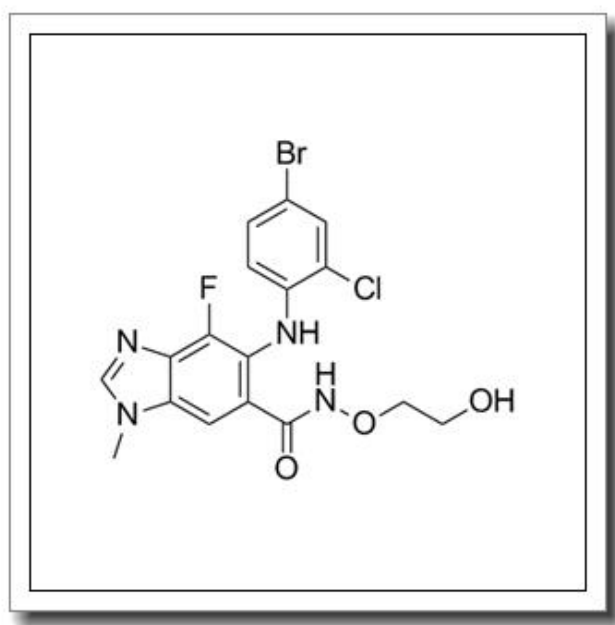


5-[(4-溴-2-氯苯基)氨基]-4-氟-N-(2-羟基乙氧基)-1-甲基-1H-苯并咪唑-6-甲酰胺

6-(4-bromo-2-chloroanilino)-7-fluoro-N-(2-hydroxyethoxy)-3-methylbenzimidazole-5-carboxamide



产品基本信息

属性	值
化学名称	6-(4-bromo-2-chloroanilino)-7-fluoro-N-(2-hydroxyethoxy)-3-methylbenzimidazole-5-carboxamide
中文名称	5-[(4-溴-2-氯苯基)氨基]-4-氟-N-(2-羟基乙氧基)-1-甲基-1H-苯并咪唑-6-甲酰胺
CAS 号	606143-52-6
分子式	C17H15BrClFN4O3
分子量	457.681
纯度	≥96%

产品说明

5-[(4-溴-2-氯苯基)氨基]-4-氟-N-(2-羟基乙氧基)-1-甲基-1H-苯并咪唑-6-甲酰胺产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 6-(4-bromo-2-chloroanilino)-7-fluoro-N-(2-hydroxyethoxy)-3-methylbenzimidazole-5-carboxamide，分子式 C₁₇H₁₅BrClFN₄O₃，分子量 457.681，CAS 号 606143-52-6。其结构包含苯并咪唑核心与溴代氯苯胺基团，具有高极性及良好的有机溶剂溶解性（如 DMSO、DMF）。纯度 ≥96%（HPLC 测定），需避光保存以防光解。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯并咪唑衍生物，该化合物通过选择性抑制特定激酶活性干扰细胞信号转导，尤其在肿瘤细胞增殖研究中表现出潜在作用。其氟原子与溴取代基增强了分子与靶标蛋白的亲合力，而羟基乙氧基侧链则优化了水溶性，使其成为药物开发中重要的先导化合物或中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于抗肿瘤药物研发领域，可作为激酶抑制剂研究的工具分子或结构修饰模板。在体外实验中用于评估凋亡诱导效应及细胞周期阻滞活性，亦可用于放射性标记探针的合成。此外，在有机合成中可作为构建复杂杂环体系的砌块。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃、干燥惰性气体环境中，有效期 24 个月。开封后建议分装使用并充氩保存。使用前需恢复至室温以避免吸湿，溶解推荐使用预冷的无水乙醇或 DMSO（浓度 ≤10 mM）。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

批次纯度经 HPLC（254 nm）及质谱双重验证，残留溶剂符合 ICH 标准。急性毒性数据（大鼠口服 LD₅₀ > 500 mg/kg）显示中等毒性，操作时应穿戴防护装备（手套、护目镜）。废弃物需按危险化学品规范处置，MSDS 备索。

注：本产品仅限科研用途，严禁用于人体或临床治疗。具体实验方案建议参考文献报道的优化条件。