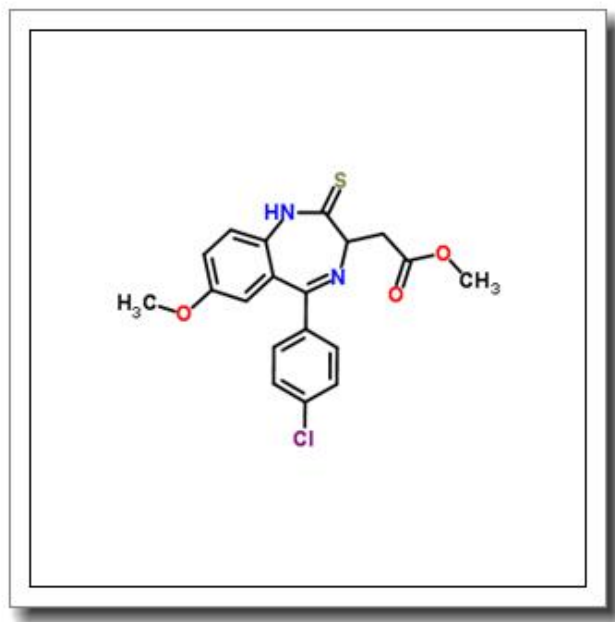


Methyl [5-(4-chlorophenyl)-7-methoxy-2-thioxo-2,3-dihydro-1H-1,4-benzodiazepin-3-yl]acetate

Methyl [5-(4-chlorophenyl)-7-methoxy-2-thioxo-2,3-dihydro-1H-1,4-benzodiazepin-3-yl]acetate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl [5-(4-chlorophenyl)-7-methoxy-2-thioxo-2,3-dihydro-1H-1,4-benzodiazepin-3-yl]acetate
中文名称	Methyl [5-(4-chlorophenyl)-7-methoxy-2-thioxo-2,3-dihydro-1H-1,4-benzodiazepin-3-yl]acetate
CAS 号	1260530-39-9
分子式	C ₁₉ H ₁₇ ClN ₂ O ₃ S
分子量	388.868
纯度	≥96%

产品说明

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-chlorophenyl)-7-methoxy-2-thioxo-2,3-dihydro-1H-1,4-benzodiazepin-3-yl]acetate，中文名称为甲基[5-(4-氯苯基)-7-甲氧基-2-硫代-2,3-二氢-1H-1,4-苯并二氮杂草-3-基]乙酸酯。其 CAS 号为 1260530-39-9，分子式为 C₁₉H₁₇C₁N₂O₃S，分子量为 388.868。该化合物属于苯并二氮杂草类衍生物，具有独特的硫代酰胺结构和氯苯基取代基，纯度 ≥96%，适合科研与工业用途。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为苯并二氮杂草类骨架的修饰物，在药物化学领域具有重要价值。其结构中的硫代基团和甲氧基可增强分子与生物靶点的相互作用，常用于中枢神经系统药物研发的中间体或先导化合物优化。此外，氯苯基的引入可能影响化合物的脂溶性和受体结合特性，为神经递质调节研究提供工具分子。

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，尤其适用于以下方向：作为 GABA 受体调节剂的合成中间体；用于抗焦虑或镇静类药物结构改造的参考标准品；在有机合成中作为构建杂环化合物的关键模块。实验室级应用包括酶抑制实验、体外活性筛选及结构-活性关系 (SAR) 研究。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C、避光、干燥条件下长期储存，短期使用可置于 2-8° C 环境。开封后需充入惰性气体保护，避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作，佩戴防护手套及护目镜。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，建议预先配制母液后稀释使用。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 验证纯度 ≥96%，批次间稳定性良好。MS 与 NMR 数据可供溯源。安

全提示：该化合物可能对眼睛、皮肤有刺激性，吸入或误食有害，操作时应遵循 GHS 分类标准（危险代码 H302/H315/H319）。废弃物需按有机有害物质处理，避免直接排放。提供材料安全数据表（MSDS）备查，紧急情况需立即就医并提供 CAS 号信息。