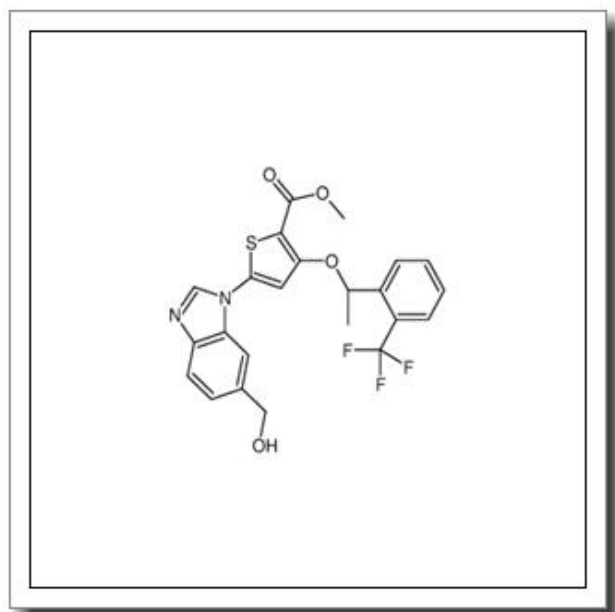


产品_4401

Methyl 5-[6-(hydroxymethyl)-1H-benzimidazol-1-yl]-3-[(1R)-1-[2-(trifluoromethyl)phenyl]ethoxy]-2-thiophenecarboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 5-[6-(hydroxymethyl)-1H-benzimidazol-1-yl]-3-[(1R)-1-[2-(trifluoromethyl)phenyl]ethoxy]-2-thiophenecarboxylate
中文名称	产品_4401
CAS 号	929095-39-6
分子式	C ₂₃ H ₁₉ F ₃ N ₂ O ₄ S
分子量	476.468
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 Methyl 5-[6-(hydroxymethyl)-1H-benzimidazol-1-yl]-3-{{(1R)-1-[2-(trifluoromethyl)phenyl]ethoxy}-2-thiophenecarboxylate, 中文名称为产品_4401, CAS 号为 929095-39-6。其分子式为 C₂₃H₁₉F₃N₂O₄S, 分子量为 476.468, 纯度 ≥96%。该化合物是一种含苯并咪唑和噻吩结构的杂环衍生物, 具有手性中心和亲脂性基团 (如三氟甲基), 在有机溶剂中溶解性良好, 但在水中溶解度较低。其结构中的羟基和酯基为其化学反应活性提供了潜在位点。

2. 生物化学功能与重要性

产品_4401 的苯并咪唑核心结构使其可能作为激酶抑制剂或受体调节剂发挥作用, 而三氟甲基的引入可增强其代谢稳定性和膜穿透性。该分子在药物化学领域具有潜在价值, 可能用于靶向特定信号通路或酶系统。其手性中心的 R 构型对生物活性可能具有关键影响, 需注意立体化学纯度的控制。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于医药研发领域, 作为先导化合物或中间体用于抗肿瘤、抗炎或抗感染药物的开发。其噻吩-苯并咪唑杂合结构在激酶抑制剂设计中具有参考价值。实验室中可用于构效关系研究、体外活性筛选或作为合成更复杂分子的砌块。使用时应根据实验需求优化溶解体系 (推荐使用 DMSO 或甲醇作为溶剂)。

4. 储存条件与使用建议

建议长期储存于-20℃、避光、干燥的环境中, 短期使用可置于 4℃。开封后需充入惰性气体 (如氮气) 保护, 避免反复冻融。工作溶液建议现配现用, 剩余溶液需标注配制日期并于-80℃保存, 避免水解或氧化。操作时需在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

本品通过 HPLC 检测纯度 ≥96%, 批号相关 COA 可随货提供。安全数据表明其可能对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时需佩戴防护手套、护目镜及实验服。如发生接触, 立

即用大量清水冲洗并就医。废弃物应作为有害化学废物处理，遵守当地法规。运输时按非危险品处理，但建议使用防震包装并避免高温。

注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验验证。更多技术参数可联系供应商获取。