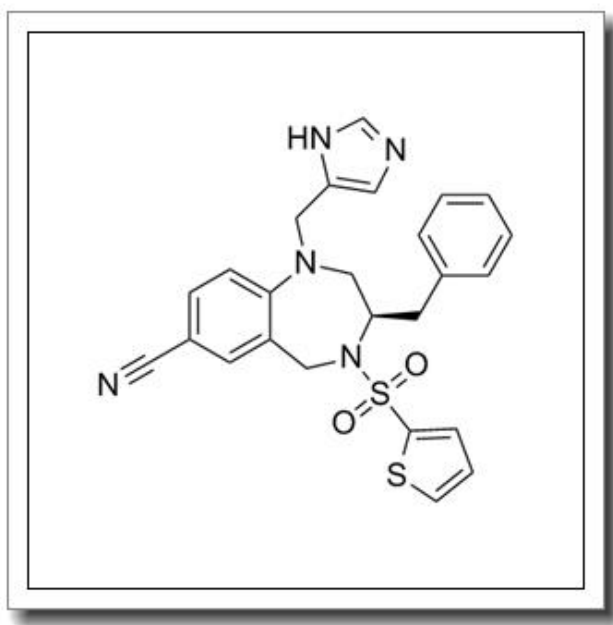


1-((1H-咪唑-4-基)甲基)-3-苄基-4-(噻吩-2-基磺酰基)-2,3,4,5-四氢-1H-苯并[e][1,4]二氮杂卓-7-甲腈

(3R)-3-benzyl-1-(1H-imidazol-5-ylmethyl)-4-thiophen-2-ylsulfonyl-3,5-dihydro-2H-1,4-benzodiazepine-7-carbonitrile



产品基本信息

属性	值
化学名称	(3R)-3-benzyl-1-(1H-imidazol-5-ylmethyl)-4-thiophen-2-ylsulfonyl-3,5-dihydro-2H-1,4-benzodiazepine-7-carbonitrile
中文名称	1-((1H-咪唑-4-基)甲基)-3-苄基-4-(噻吩-2-基磺酰基)-2,3,4,5-四氢-1H-苯并[e][1,4]二氮杂卓-7-甲腈
CAS 号	195987-41-8
分子式	C ₂₅ H ₂₃ N ₅ O ₂ S ₂
分子量	489.612

纯度	$\geq 96\%$
----	-------------

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(3R)-3-benzyl-1-(1H-imidazol-5-ylmethyl)-4-thiophen-2-ylsulfonyl-3,5-dihydro-2H-1,4-benzodiazepine-7-carbonitrile（中文名称见标题），CAS 号为 195987-41-8。其分子式为 C₂₅H₂₃N₅O₂S₂，分子量为 489.612，纯度 ≥96%。该化合物属于苯并二氮杂卓衍生物，结构中含有咪唑基、苄基、噻吩磺酰基及氰基等官能团，具有显著的立体选择性和分子复杂性，适合用于药物化学研究与生物活性筛选。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物通过其独特的结构特征，可靶向特定酶或受体（如 GABA 受体或激酶家族），在神经信号调控或细胞增殖抑制中发挥潜在作用。其苯并二氮杂卓骨架与磺酰基的引入，增强了代谢稳定性和膜穿透性，使其成为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

主要应用于医药研发领域，尤其是中枢神经系统药物（如抗焦虑、抗癫痫）和抗肿瘤药物的分子设计。具体用途包括：

- 作为小分子抑制剂用于体外酶活性实验
- 用于构效关系研究中的结构修饰模板
- 在放射性标记或荧光标记后作为分子探针

4. 储存条件与使用建议

建议在-20℃下避光干燥储存，长期保存需充入惰性气体。使用时需在干燥惰性氛围（如氮气手套箱）中操作，避免反复冻融。溶解推荐使用 DMSO 或二氯甲烷，配制后溶液建议现配现用。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 和 NMR 验证纯度，批号相关 COA 可随货提供。安全注意事项：

- 穿戴防护手套、护目镜及实验服

- 避免吸入粉尘或接触皮肤，操作区域需通风良好
- 废弃物按危险化学品规范处置
- 急救措施：皮肤接触后立即用肥皂水冲洗，眼睛接触时用生理盐水冲洗并就医