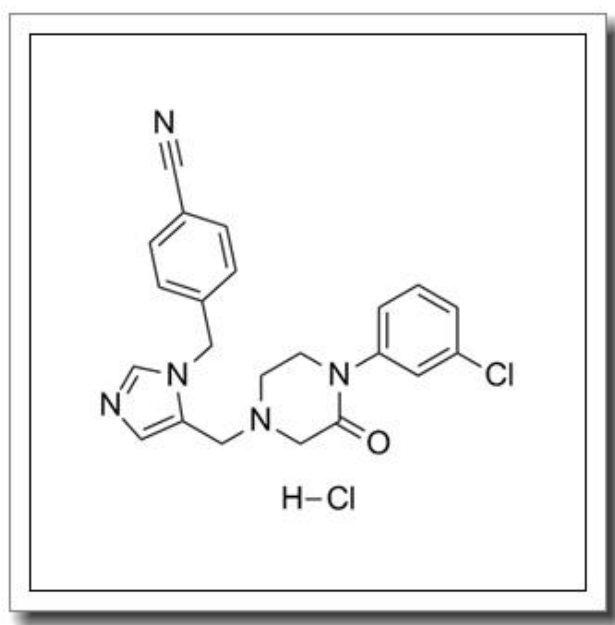


4-((5-((4-(3-氯苯基)-3-氧代哌嗪-1-基)甲基)-1H-咪唑-1-基)甲基)苯甲腈盐酸盐

4-[[[5-[[4-(3-chlorophenyl)-3-oxopiperazin-1-yl]methyl]imidazol-1-yl]methyl]benzotrile, hydrochloride



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-[[[5-[[4-(3-chlorophenyl)-3-oxopiperazin-1-yl]methyl]imidazol-1-yl]methyl]benzotrile, hydrochloride
中文名称	4-((5-((4-(3-氯苯基)-3-氧代哌嗪-1-基)甲基)-1H-咪唑-1-基)甲基)苯甲腈盐酸盐
CAS 号	253863-00-2
分子式	C ₂₂ H ₂₁ C ₁₂ N ₅ O
分子量	442.341
纯度	≥96%

产品说明

4-((5-((4-(3-氯苯基)-3-氧代哌嗪-1-基)甲基)-1H-咪唑-1-基)甲基)苯甲腈
盐酸盐产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 4-[[5-[[4-(3-chlorophenyl)-3-oxopiperazin-1-yl]methyl]imidazol-1-yl]methyl]benzotrile hydrochloride，分子式 C₂₂H₂₁Cl₂N₅O，分子量 442.341，CAS 号 253863-00-2。其结构中包含哌嗪酮、咪唑和苯甲腈基团，赋予其独特的生物活性与化学稳定性。纯度 ≥96% (HPLC)，易溶于 DMSO 和甲醇，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是一种小分子抑制剂，通过靶向特定激酶或受体（如 5-HT 受体家族）调控细胞信号通路。其 3-氧代哌嗪结构可增强与蛋白质活性位点的结合能力，而氯苯基与苯甲腈基团则贡献疏水相互作用，在药物研发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

作为关键中间体或活性成分，广泛应用于神经科学和抗肿瘤药物研究领域。具体用途包括：1) 用于体外酶活性抑制实验；2) 作为先导化合物优化结构-活性关系 (SAR)；3) 在细胞模型中评估凋亡或增殖抑制效果。

4. 储存条件与使用建议

建议避光保存于 -20℃ 干燥环境中，长期储存需充惰性气体保护。使用时需平衡至室温再开瓶，避免反复冻融。溶解推荐使用 DMSO 配制母液 (10 mM)，并用缓冲液稀释至工作浓度。注意现配现用，剩余溶液建议分装冻存。

5. 质量控制与安全信息

经 HPLC、NMR 和质谱严格验证，符合科研级标准。操作时需穿戴防护装备（手套、护目镜），避免吸入或接触皮肤。如意外暴露，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物按危险化学品规范处置。本产品仅限科研使用，禁止用于人体或临床。

(注：实际应用前请查阅最新文献并优化实验条件)