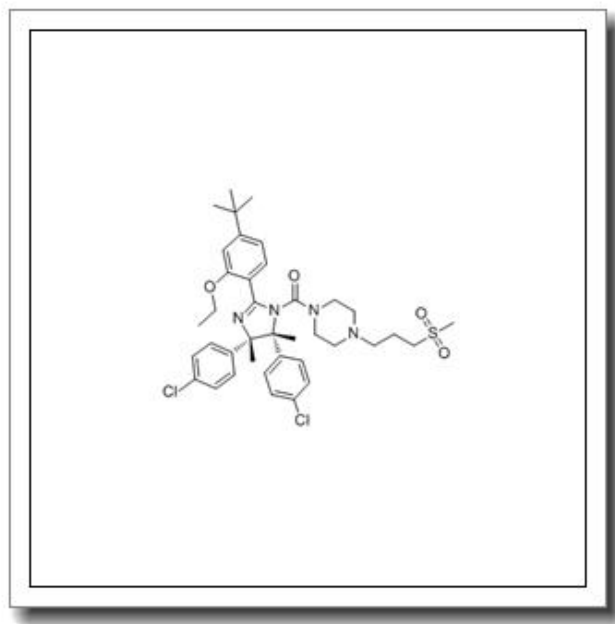


[(4R,5S)-4,5-双(4-氯苯基)-2-[4-(1,1-二甲ethyl乙基)-2-乙氧基苯基]-4,5-二氢-4,5-二甲基-1H-咪唑-1-基][4-[3-(甲磺酰基)丙基]-1-哌嗪基]甲酮

[(4S, 5R)-2-(4-tert-butyl-2-ethoxyphenyl)-4, 5-bis(4-chlorophenyl)-4, 5-dimethylimidazol-1-yl]-[4-(3-methylsulfonylpropyl)piperazin-1-yl]methanone



产品基本信息

属性	值
化学名称	[(4S, 5R)-2-(4-tert-butyl-2-ethoxyphenyl)-4, 5-bis(4-chlorophenyl)-4, 5-dimethylimidazol-1-yl]-[4-(3-methylsulfonylpropyl)piperazin-1-yl]methanone
中文名称	[(4R, 5S)-4, 5-双(4-氯苯基)-2-[4-(1,1-二甲ethyl乙基)-2-乙氧基苯基]-4, 5-二氢-4, 5-二甲基-1H-咪唑-1-基][4-[3-(甲磺酰基)丙基]-1-哌嗪基]甲酮

	(1,1-二甲基乙基)-2-乙氧基苯基]- 4,5-二氢-4,5-二甲基-1H-咪唑-1- 基][4-[3-(甲磺酰基)丙基]-1-哌嗪基] 甲酮
CAS 号	939981-39-2
分子式	C ₃₈ H ₄₈ C ₁₂ N ₄ O ₄ S
分子量	727.783
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[(4S, 5R)-2-(4-tert-butyl-2-ethoxyphenyl)-4, 5-bis(4-chlorophenyl)-4, 5-dimethylimidazol-1-yl]-[4-(3-methylsulfonylpropyl)piperazin-1-yl]methanone，中文名称见标题。其 CAS 号为 939981-39-2，分子式为 C₃₈H₄₈Cl₂N₄O₄S，分子量为 727.783。该化合物结构复杂，含咪唑环、哌嗪环及多个取代苯环，具有显著的空间位阻和手性中心（4S, 5R 构型）。纯度 ≥96%，通常为白色至类白色结晶粉末，需通过 HPLC 或 LC-MS 验证纯度。

2. 生物化学功能与重要性

该分子通过其独特结构可选择性结合特定蛋白靶点（如激酶或 G 蛋白偶联受体），抑制或激活下游信号通路。其甲磺酰基和哌嗪基团增强水溶性，而氯苯基和叔丁基赋予疏水性，平衡了细胞膜穿透性。在药物研发中，此类化合物常用于先导化合物优化或作为分子探针研究疾病机制（如癌症、炎症）。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域：

- 作为小分子抑制剂用于肿瘤学或免疫学靶点筛选
- 用于结构-活性关系（SAR）研究，优化药物效价与选择性
- 在体外实验中评估其对特定酶或受体的调控作用
- 可能作为中间体用于合成更复杂的生物活性分子

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃干燥避光环境，开封后需充惰性气体保护。溶解建议使用 DMSO（浓度 ≤10 mM），避免反复冻融。实验操作需在通风橱中进行，佩戴防护手套及护目镜。工作浓度需根据预实验确定，建议从低浓度（如 1 μM）开始梯度测试。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC、NMR 及质谱验证结构，批号相关 COA 可随货提供。潜在危害包括呼吸

道刺激（H332）和皮肤刺激（H315），需参照 SDS 操作。废弃物应作为有害化学品处理，不可直接排放。运输分类为非危险品，但建议使用冰袋维持低温链。

注：具体应用需结合文献与实验设计，建议用户查阅最新研究进展以确定适用性。