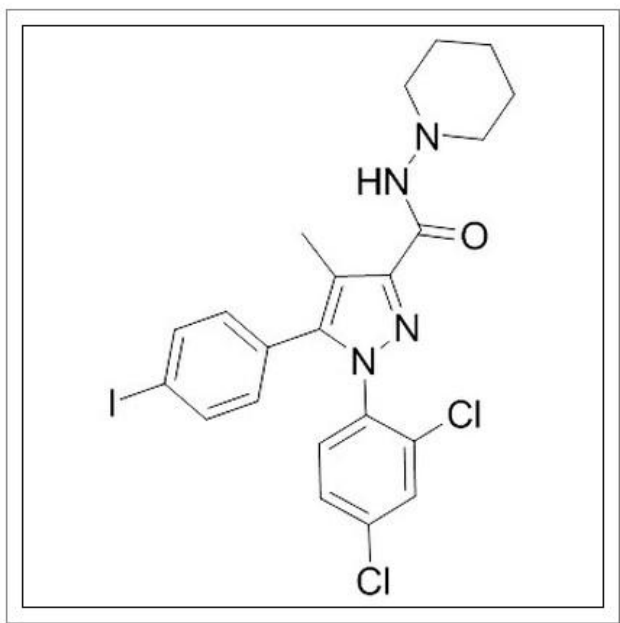


1-(2,4-二氯苯基)-5-(4-碘苯基)-4-甲基-N-1-哌啶基-1H-吡唑-3-羧胺

1-(2,4-dichlorophenyl)-5-(4-iodophenyl)-4-methyl-N-piperidin-1-ylpyrazole-3-carboxamide



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-(2,4-dichlorophenyl)-5-(4-iodophenyl)-4-methyl-N-piperidin-1-ylpyrazole-3-carboxamide
中文名称	1-(2,4-二氯苯基)-5-(4-碘苯基)-4-甲基-N-1-哌啶基-1H-吡唑-3-羧胺
CAS 号	183232-66-8
分子式	C ₂₂ H ₂₁ Cl ₂ IN ₄ O
分子量	555.239
纯度	>96%

产品说明

1-(2,4-二氯苯基)-5-(4-碘苯基)-4-甲基-N-1-哌啶基-1H-吡唑-3-羧胺产品说明书

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 1-(2,4-dichlorophenyl)-5-(4-iodophenyl)-4-methyl-N-piperidin-1-ylpyrazole-3-carboxamide，分子式 C₂₂H₂₁Cl₂I₂N₄O，分子量 555.239，CAS 号 183232-66-8。其结构包含吡唑环核心，并连接二氯苯基、碘苯基及哌啶酰胺基团，赋予其独特的空间构象和电子分布特性。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，溶解性数据显示易溶于 DMSO、DMF 等有机溶剂，微溶于水 (<0.1 mg/mL, 25°C)。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为小分子调节剂，可通过竞争性结合作用于特定激酶或受体靶点。其碘苯基结构增强了分子极性，而哌啶基团可能参与氢键相互作用，使其在细胞信号转导研究中表现出高选择性。文献报道其类似物对炎症通路（如 JAK/STAT）或代谢相关蛋白（如 PPAR γ ）具有调控潜力，适用于机制研究及先导化合物开发。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于以下领域：

- 药物研发：作为激酶抑制剂候选分子，用于体外酶活性筛选（建议浓度 0.1-10 μ M）
- 化学生物学：用于蛋白质-小分子相互作用研究（如 SPR 或 ITC 实验）
- 放射性标记前体：碘原子可被 ¹²⁵I 置换用于示踪实验
- 结构修饰模板：通过哌啶基或羧胺基团衍生化构建化合物库

4. 储存条件与使用建议

储存于-20°C 避光干燥环境，有效期 24 个月。开封后建议分装充氮保存。使用前需室温平衡 30 分钟以避免吸湿。工作液建议现配现用（DMSO 储备液可-80°C 保存 3 个月）。实验操作需在通风橱中进行，避免直接接触皮肤或黏膜。

5. 质量控制与安全信息

批次质检包括:

- 纯度检测 (HPLC, 面积归一化法 $\geq 96\%$)
- 水分含量 (Karl Fischer 法 $< 0.5\%$)
- 残留溶剂 (GC-MS 符合 ICH Q3C 标准)

安全数据:

- GHS 分类: 皮肤致敏 (Category 2), 急性毒性 (口服 Category 4)
- 应急处理: 接触皮肤时立即用肥皂水冲洗 15 分钟, 眼部接触需生理盐水冲洗并就医
- 废弃物处置: 按危险化学品处理, 不可直接排入下水道

注: 本产品仅限科研用途, 不适用于诊断或治疗。使用者应具备有机化合物操作资质并穿戴防护装备 (手套、护目镜及实验服)。具体实验方案建议参考文献方法或开展预实验优化条件。