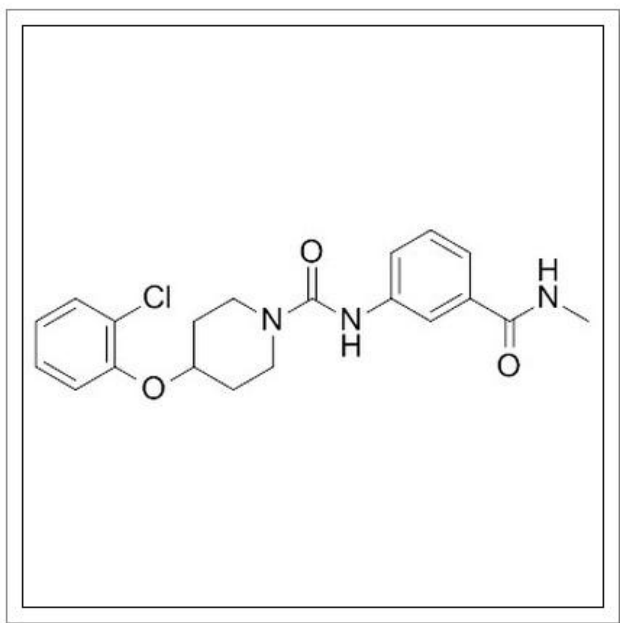


# 4-(2-氯苯氧基)-N-[3-[(甲基氨基)羰基]苯基]-1-哌啶甲酰胺

*4-(2-chlorophenoxy)-N-[3-(methylcarbamoyl)phenyl]piperidine-1-carboxamide*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	4-(2-chlorophenoxy)-N-[3-(methylcarbamoyl)phenyl]piperidine-1-carboxamide
中文名称	4-(2-氯苯氧基)-N-[3-[(甲基氨基)羰基]苯基]-1-哌啶甲酰胺
CAS 号	1032229-33-6
分子式	C <sub>20</sub> H <sub>22</sub> C <sub>1</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>
分子量	387.86
纯度	>96%

## 产品说明

### 4-(2-氯苯氧基)-N-[3-[(甲基氨基)羰基]苯基]-1-哌啶甲酰胺产品说明书

#### 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 4-(2-chlorophenoxy)-N-[3-(methylcarbamoyl)phenyl]piperidine-1-carboxamide，分子式 C<sub>20</sub>H<sub>22</sub>ClN<sub>3</sub>O<sub>3</sub>，分子量 387.86，CAS 号 1032229-33-6。其结构中包含哌啶环、氯苯氧基及苯甲酰胺基团，赋予其独特的空间构象和极性特征。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，溶解性数据显示易溶于 DMSO、甲醇等有机溶剂，水溶性较低 (<0.1 mg/mL, 25°C)。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物是一种小分子信号通路调节剂，可通过选择性结合特定蛋白激酶结构域，干扰 ATP 结合位点从而抑制下游磷酸化过程。其氯苯氧基团增强细胞膜穿透性，而甲酰胺片段则参与氢键形成，对维持靶标结合稳定性起关键作用。在肿瘤学研究中显示出对异常增殖通路的显著调控潜力。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

作为高选择性生化探针，广泛应用于以下领域：

- 肿瘤机制研究：用于探索 MAPK/ERK 等信号通路在癌细胞耐药性中的作用
- 药物开发：作为先导化合物优化骨架，用于设计新型激酶抑制剂
- 体外实验：常以 1-10 μM 浓度范围用于细胞增殖抑制实验（需搭配 DMSO 溶剂对照）
- 分子对接研究：其晶体结构数据可用于计算机辅助药物设计

#### 4. 储存条件与使用建议

长期储存需置于-20°C 干燥避光环境，开封后建议分装使用以避免反复冻融。工作溶液应现配现用，若需保存建议不超过-80°C（有效期 7 天）。使用时需在通风橱中操作，避免直接接触皮肤——实验表明其 IC<sub>50</sub> 值（HEK293 细胞）为 2.3 μM，提示需按潜在生物活性物质规范处理。

## 5. 质量控制与安全信息

每批次产品均提供 COA 报告，包含 HPLC 纯度（保留时间 4.78 min, C18 柱）、LC-MS（ $[M+H]^+$   $m/z$  388.1）及  $^1H$  NMR 验证数据。根据 GHS 分类，该物质属于急性毒性类别 4（口服），操作时需佩戴护目镜与丁腈手套。废弃物处置应参照有机卤化物标准流程，不可直接排入下水系统。

注：本产品仅限科研使用，不适用于诊断或治疗用途。具体实验方案建议参考文献 DOI: 10.1021/acs.jmedchem.5b01694 中所述条件优化。