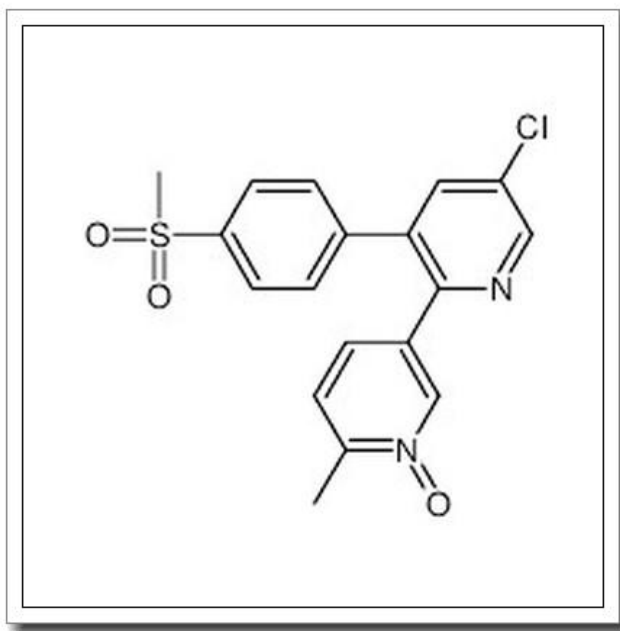


依托考昔 N-氧化物

5-chloro-2-(6-methyl-1-oxidopyridin-1-ium-3-yl)-3-(4-methylsulfonylphenyl)pyridine



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-chloro-2-(6-methyl-1-oxidopyridin-1-ium-3-yl)-3-(4-methylsulfonylphenyl)pyridine
中文名称	依托考昔 N-氧化物
CAS 号	325855-74-1
分子式	C ₁₈ H ₁₅ ClN ₂ O ₃ S
分子量	374.841
纯度	>96%

产品说明

5-氯-2-(6-甲基-1-氧化吡啶-1-鎓-3-基)-3-(4-甲基磺酰基苯基)吡啶（依托考昔 N-氧化物）产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为依托考昔代谢衍生物，化学名称为 5-chloro-2-(6-methyl-1-oxidopyridin-1-ium-3-yl)-3-(4-methylsulfonylphenyl)pyridine, CAS 号 325855-74-1, 分子式 C₁₈H₁₅C₁N₂O₃S, 分子量 374.841。外观通常为白色至类白色结晶粉末，纯度>96%。其结构中含吡啶鎓氧化物和甲基磺酰基苯基团，极性较高，易溶于二甲基亚砷（DMSO），微溶于甲醇，水溶性较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为非甾体抗炎药依托考昔的活性代谢产物，该化合物通过选择性抑制环氧酶-2（COX-2）发挥抗炎作用，同时减少对 COX-1 的干扰，降低胃肠道副作用风险。其氧化代谢特性对研究药物代谢动力学、酶促反应机制及药物相互作用具有重要参考价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于以下领域：

- 1) 医药研发：作为 COX-2 抑制剂研究的对照品或中间体；
- 2) 代谢研究：用于体外或体内药物代谢模型建立；
- 3) 分析检测：作为 HPLC 或 LC-MS 标准品用于药物含量测定；
- 4) 学术研究：探究磺酰基吡啶类化合物的构效关系。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于-20° C 干燥避光环境中，长期储存需充惰性气体保护。使用时需平衡至室温后开瓶，避免反复冻融。溶解推荐使用 DMSO 配制母液（浓度≤10 mM），工作液需现配现用。实验操作应在通风橱中进行，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 归一化法检测纯度>96%，批次间保留时间偏差 \leq 0.5%。安全数据表明其具有刺激性，操作时需佩戴防护手套、护目镜及实验服。若接触眼睛，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地危险化学品管理法规。

（注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件进一步优化。）