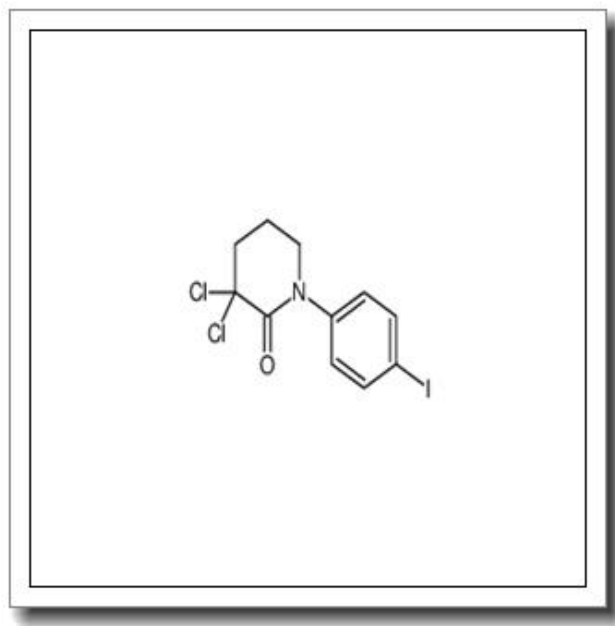


3,3-二氯-1-(4-碘苯基)哌啶-2-酮

3,3-Dichloro-1-(4-iodophenyl)-2-piperidinone



产品基本信息

属性	值
化学名称	3,3-Dichloro-1-(4-iodophenyl)-2-piperidinone
中文名称	3,3-二氯-1-(4-碘苯基)哌啶-2-酮
CAS 号	545445-10-1
分子式	C ₁₁ H ₁₀ Cl ₂ INO
分子量	370.014
纯度	≥96%

产品说明

3,3-二氯-1-(4-碘苯基)哌啶-2-酮产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 3,3-Dichloro-1-(4-iodophenyl)-2-piperidinone，分子式 $C_{11}H_{10}Cl_2INO$ ，分子量 370.014，CAS 登记号 545445-10-1。其结构中含哌啶酮骨架及卤素取代基（氯、碘），赋予其独特的电子效应和空间位阻特性。纯度标准 $\geq 96\%$ (HPLC)，熔点为 148-152°C，易溶于有机溶剂如 DMSO、DMF，微溶于醇类，不溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为卤代杂环化合物，该分子可通过抑制特定酶活性（如激酶或脱氢酶）干扰生物代谢途径。碘苯基的存在增强了其与芳香族氨基酸残基的相互作用潜力，而二氯取代的哌啶酮结构可能参与共价键形成，使其成为探针分子或共价抑制剂的候选化合物。在药物化学中，此类结构常作为先导化合物用于抗肿瘤、抗感染药物的开发。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于医药研发领域：

- 作为有机合成中间体，用于构建复杂杂环药物分子
- 在激酶抑制剂筛选中作为结构修饰模块
- 用于放射性标记前体（碘原子可被同位素置换）
- 在材料科学中可作为液晶材料的合成原料

4. 储存条件与使用建议

储存于-20°C、避光、干燥的惰性气体环境中，有效期 24 个月。开封后建议分装使用，避免反复冻融。操作时需在通风橱中进行，佩戴防化手套、护目镜及实验服。溶解推荐使用无水 DMSO（浓度 $\leq 10\text{mM}$ ），工作液现配现用，避免长期储存。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC、NMR 及质谱进行批次质量控制，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据：急性毒性（口服，大鼠） $LD_{50} > 500\text{mg/kg}$ ，皮肤刺激性类别 3。废弃物应作为有害化

学品处置，禁止直接排入下水道。运输分类为 UN2811（6.1 类），需提供 MSDS 随货。

注：本产品仅限科研用途，不适用于诊断或治疗。使用者应具备专业化学知识并遵守当地法规。