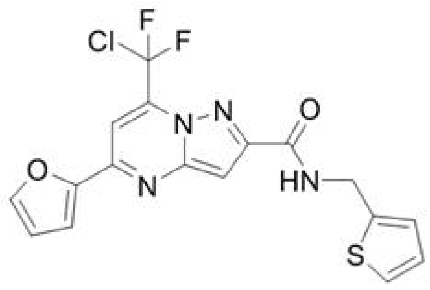
Anguizole

7-[chloro(difluoro)methyl]-5-(furan-2-yl)-N-(thiophen-2-ylmethyl)pyrazolo[1,5-a]pyrimidine-2-carboxamide



产品基本信息

属性	值
化学名称	7-[chloro(difluoro)methyl]-5-(furan-2-yl)-N-(thiophen-2-ylmethyl)pyrazolo[1,5-a]pyrimidine-2-carboxamide
中文名称	Anguizole
CAS 号	442666-98-0
分子式	C17H11ClF2N4O2S
分子量	408.81
纯度	≧96%

产品说明

7-[氯(二氟)甲基]-5-(呋喃-2-基)-N-(噻吩-2-基甲基)吡唑并[1,5-a]嘧啶-2-甲酰胺（Anguizole）产品说明书

1. 产品概述与化学特性

Anguizole 是一种结构复杂的杂环化合物，化学式为 C17H11ClF2N4O2S，分子量 408.81，CAS 号为 442666-98-0。该化合物包含吡唑并嘧啶核心骨架，并修饰以氯二氟甲基、呋喃基及噻吩甲基甲酰胺等官能团，赋予其独特的电子特性和空间构型。其高纯度（≥96%）通过 HPLC 验证，外观通常为白色至类白色结晶粉末，可溶于 DMSO 等有机溶剂，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

Anguizole 作为小分子抑制剂，可通过靶向特定蛋白激酶或受体干扰细胞信号通路。其分子结构中的氯二氟甲基和杂环体系增强了与靶标的结合亲和力，而呋喃和噻吩基团可能参与π-π堆积相互作用。该化合物在调控炎症、肿瘤增殖或代谢疾病相关靶点中表现出潜在活性，是药物化学研究中的重要工具分子。

3. 主要应用领域与具体用途

Anguizole 主要用于学术研究及药物开发领域：

- 作为先导化合物，用于优化激酶抑制剂的构效关系研究
- 在细胞模型中评估其对特定通路（如 JAK/STAT 或 MAPK）的调控作用
- 用于体外酶活性测定，探究其 IC50 值及选择性谱
- 可能拓展至抗纤维化或自身免疫性疾病的新药筛选

4. 储存条件与使用建议

本品需避光保存于-20℃干燥环境中，长期储存建议充氮密封。使用前需平衡至室温并避免反复冻融。推荐工作浓度通过预实验确定（通常 1-100 μM 范围），溶解时建议先用 DMSO 配制母液再稀释至缓冲体系，注意控制终浓度 DMSO 不超过 0.1%（v/v）。

5. 质量控制与安全信息

批次纯度经 HPLC-UV 检测，残留溶剂符合 ICH 标准。操作时需佩戴防护装备（手套、护目镜），避免吸入或接触皮肤。MSDS 数据显示其急性毒性为 GHS 类别 4，但长期暴露风险尚未完全评估。废弃物应作为有害化学品处置，严禁直接排放。

本产品仅限科研用途，不适用于诊断或治疗用途。使用者应具备有机化合物操作经验并遵守实验室安全规范。