

2-Methoxy-4-[4-(4-Methylpiperazin-1-yl)piperidin-1-yl]aniline

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Methoxy-4-[4-(4-Methylpiperazin-1-yl)piperidin-1-yl]aniline
产品目录号	
CAS 号	761440-75-9
分子式	C17H28N4O
分子量	304.43
纯度	>96%

产品说明

2-Methoxy-4-[4-(4-Methylpiperazin-1-yl)piperidin-1-yl]aniline 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至淡黄色结晶性粉末，化学名称 2-Methoxy-4-[4-(4-Methylpiperazin-1-yl)piperidin-1-yl]aniline，CAS 号 761440-75-9，分子式 C₁₇H₂₈N₄O，分子量 304.43。其结构中包含甲氧基苯胺骨架与哌啶-甲基哌嗪杂环体系，赋予其独特的空间构型和电子分布特性。纯度经 HPLC 验证 $\geq 96\%$ ，溶解性数据显示易溶于有机溶剂如 DMSO 和甲醇，水溶性较低 ($< 0.1 \text{ mg/mL}$, 25°C)。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为多靶点调节剂，可通过与 G 蛋白偶联受体 (GPCRs) 及激酶结构域相互作用，影响细胞内信号转导通路。其哌嗪基团提供碱性中心，能与生物大分子形成氢键或离子相互作用，而甲氧基苯胺部分可能参与 $\pi-\pi$ 堆积作用。在神经递质调控和细胞增殖抑制研究中表现出潜在活性，是开发中枢神经系统药物和抗肿瘤先导化合物的关键中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

目前主要应用于以下领域：

- (1) 药物研发：作为激酶抑制剂（如 ALK、c-Met）的核心结构单元，用于非小细胞肺癌靶向治疗药物的合成。
- (2) 生化探针：标记后可用于膜受体定位研究，特别是多巴胺受体亚型的体外检测。
- (3) 有机合成：作为手性胺类砌块，参与不对称催化反应构建复杂杂环体系。

4. 储存条件与使用建议

推荐避光保存于 -20°C 干燥环境中，开封后需充氮气密封。工作溶液建议现配现用，若需保存应置于 -80°C（有效期 7 天）。实验操作需在通风橱中进行，避免直

接触皮肤或吸入粉尘。溶解时优先选用预冷 DMSO (浓度 ≤ 10 mM)，后续可用缓冲液稀释至工作浓度。

5. 质量控制与安全信息

批次质检报告包含 HPLC 纯度 ($\geq 96\%$)、LC-MS 分子量验证及重金属残留 (< 10 ppm) 数据。根据 GHS 分类，该产品具刺激性 (H315-H319) 和急性毒性 (H302)，操作时应佩戴护目镜、丁腈手套及防护服。废弃物需按危险化学品规范处置，紧急接触时立即用大量清水冲洗并就医。

本产品仅限科研用途，不适用于诊断或治疗应用。具体实验方案建议参考文献报道的优化条件。