

2-Methyl-2-propanyl (3S)-3-(4-bromophenyl)-1-piperidinecarboxylate

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	2-Methyl-2-propanyl (3S)-3-(4-bromophenyl)-1-piperidinecarboxylate
产品目录号	
CAS 号	1476776-55-2
分子式	C16H22BrN02
分子量	340.255
纯度	>96%

产品说明

2-Methyl-2-propanyl (3S)-3-(4-bromophenyl)-1-piperidinecarboxylate
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 2-甲基-2-丙基 (3S)-3-(4-溴苯基)-1-哌啶甲酸酯，CAS 号为 1476776-55-2，分子式为 C₁₆H₂₂BrN₀₂，分子量为 340.255。其纯度经高效液相色谱 (HPLC) 验证大于 96%，具有明确的手性中心 (3S 构型) 和稳定的酯键结构。该化合物在常温下溶于常见有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇，但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌啶类衍生物，该分子通过其 4-溴苯基和羧酸酯基团的协同作用，表现出显著的生物活性。其结构中的手性中心对靶标蛋白 (如某些神经递质受体或酶) 具有选择性结合能力，在药物化学研究中常用于先导化合物优化或活性分子探针开发。溴原子的引入增强了分子与芳香族氨基酸残基的相互作用，为药物设计提供了关键的分子识别位点。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于医药研发领域，具体用途包括：

- 作为激酶抑制剂或 GPCR 调节剂的中间体
- 用于构建神经退行性疾病相关药物分子库
- 在不对称合成中作为手性模板
- 放射性标记前体 (利用溴原子进行同位素置换)

实验室研究显示，其衍生物可能对帕金森病靶点具有调控潜力。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20°C、避光、干燥条件下长期储存，开封后需充惰性气体保护。使用前需平衡至室温以避免结露，称量应在通风橱中进行。推荐使用玻璃或聚丙烯材质的容

器盛装，避免与强氧化剂接触。工作浓度需根据实验体系优化，DMSO 配制母液时可加热至 40℃促进溶解。

5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱（MS）和核磁共振（NMR）验证结构，批次间 HPLC 纯度差异小于 2%。安全数据表明其具有刺激性，操作时需佩戴护目镜和丁腈手套，皮肤接触后应立即用大量清水冲洗。废弃物应作为有害化学废物处理，不可直接排入下水道。详细毒理学数据可参考随附的 SDS 文件。

注：本产品仅限科研使用，不适用于诊断或治疗用途。