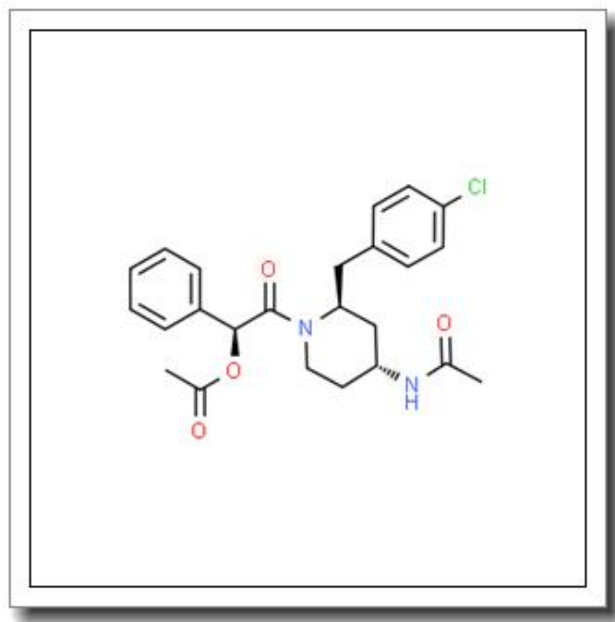


(1S)-2-[(2S,4R)-4-Acetamido-2-(4-chlorobenzyl)-1-piperidinyl]-2-oxo-1-phenylethyl acetate

(1S)-2-[(2S,4R)-4-Acetamido-2-(4-chlorobenzyl)-1-piperidinyl]-2-oxo-1-phenylethyl acetate



产品基本信息

属性	值
化学名称	(1S)-2-[(2S,4R)-4-Acetamido-2-(4-chlorobenzyl)-1-piperidinyl]-2-oxo-1-phenylethyl acetate
中文名称	(1S)-2-[(2S,4R)-4-Acetamido-2-(4-chlorobenzyl)-1-piperidinyl]-2-oxo-1-phenylethyl acetate
CAS 号	177770-52-4
分子式	C ₂₄ H ₂₇ C ₁ N ₂ O ₄
分子量	442.935
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品为高纯度有机化合物，化学名称为(1S)-2-[(2S, 4R)-4-乙酰氨基-2-(4-氯苄基)-1-哌啶基]-2-氧代-1-苯乙基乙酸酯，CAS 号为 177770-52-4。其分子式为 C₂₄H₂₇ClN₂O₄，分子量为 442.935，纯度 ≥96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末，具有特定的立体构型（1S, 2S, 4R），在有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO 中具有良好的溶解性，但在水中溶解度较低。其结构中的乙酰氨基、氯苄基和苯乙基等官能团赋予其独特的化学性质。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是一种重要的手性中间体，其结构中的哌啶环和苯乙基片段使其在生物活性分子设计中具有关键作用。乙酰氨基和氯苄基的引入可增强其与生物靶标的相互作用，例如作为酶抑制剂或受体调节剂的潜在活性。其立体选择性合成和高纯度特性使其在药物研发中尤为重要，尤其适用于抗肿瘤、抗炎或中枢神经系统药物的开发。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发领域，特别是作为手性合成砌块用于以下方向：

- 新型小分子药物的设计与合成，如蛋白酶抑制剂或 GPCR 靶向药物。
- 作为放射性标记或荧光标记的前体，用于分子探针的制备。
- 在不对称催化反应中作为配体或中间体，优化反应立体选择性。
- 学术研究中的结构-活性关系（SAR）分析，用于探索药效团的作用机制。

4. 储存条件与使用建议

为确保稳定性，产品需避光保存于-20° C 的干燥环境中，开封后建议充氮保护以延长保质期。使用前需恢复至室温并避免反复冻融。实验操作应在通风橱中进行，佩戴防护手套和护目镜。溶解时建议优先选择无水 DMSO 或乙醇，配制溶液后需尽快使用或分装冻存。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，并通过核磁共振 (NMR) 和质谱 (MS) 验证结构。安全数据表明，其可能对眼睛和皮肤有刺激性，操作时需遵循 GHS 标准，危险代码为 H315-H319-H335。废弃物应作为有害化学品处理，避免直接排放。如需进一步毒理学数据，可参考 CAS 号 177770-52-4 的 MSDS 文件。