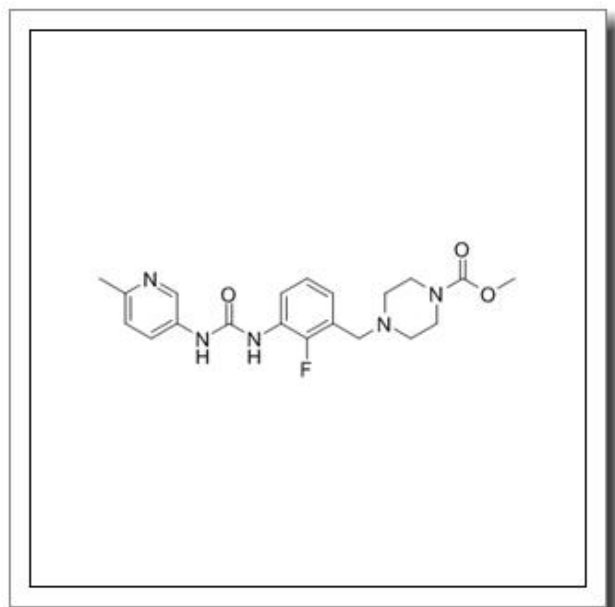


4-[[2-氟-3-[N'-(6-甲基吡啶-3-基)脲基]苯基]甲基]哌嗪-1-羧酸甲酯

methyl 4-[[2-fluoro-3-[(6-methylpyridin-3-yl)carbamoylamino]phenyl]methyl]piperazine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 4-[[2-fluoro-3-[(6-methylpyridin-3-yl)carbamoylamino]phenyl]methyl]piperazine-1-carboxylate
中文名称	4-[[2-氟-3-[N'-(6-甲基吡啶-3-基)脲基]苯基]甲基]哌嗪-1-羧酸甲酯
CAS 号	873697-71-3
分子式	C ₂₀ H ₂₄ FN ₅ O ₃
分子量	401.435
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶粉末，化学名称为 4-[[2-氟-3-[N'-(6-甲基吡啶-3-基)脲基]苯基]甲基]哌嗪-1-羧酸甲酯，CAS 号为 873697-71-3，分子式 C₂₀H₂₄FN₅O₃，分子量 401.435。其结构中包含哌嗪环、氟代苯基及脲基团，赋予其独特的生物活性和化学稳定性。纯度 ≥96%，符合 HPLC 检测标准，溶解性表现为微溶于水，易溶于有机溶剂如 DMSO 和甲醇。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是一种小分子抑制剂，通过特异性结合靶蛋白（如激酶或受体）发挥调控作用。其氟原子和脲基结构增强了与靶点的亲和力，而哌嗪环则优化了分子穿透细胞膜的能力。在信号通路研究中，它常用于干扰特定蛋白-蛋白相互作用，或作为探针分子揭示疾病相关机制。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于药物研发和基础研究领域。在抗肿瘤药物筛选中，可作为先导化合物用于优化激酶抑制剂；在神经科学中，可能用于调节多巴胺或 5-HT 受体相关通路。此外，它还可作为中间体合成更复杂的生物活性分子，或用于放射性标记以进行体内外示踪实验。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20℃ 干燥环境中，避免光照和湿度。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用前需恢复至室温并短暂离心。实验操作建议在通风橱中进行，佩戴防护手套和护目镜。配制溶液时优先使用新鲜无水溶剂，避免反复冻融。

5. 质量控制与安全信息

批次产品均通过核磁共振（NMR）和质谱（MS）验证结构，HPLC 检测纯度 ≥96%。急性毒性数据显示其 LD₅₀（大鼠口服）>500 mg/kg，但仍需按有害化学品处理。废弃物应分类收集并由专业机构处置。安全数据表（SDS）包含详细毒理学信息，使用前务必查阅。

注：本产品仅限科研用途，不可用于人体或临床诊断。具体实验方案需根据研究目的优化。