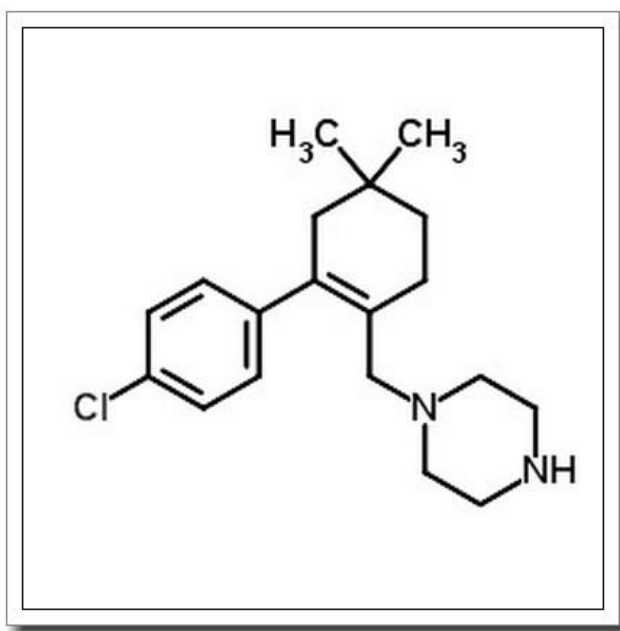


1-{[2-(4-氯苯基)-4,4-二甲基环己-1-烯基]甲基}哌嗪

1- {[2-(4-Chlorophenyl)-4,4-dimethyl-1-cyclohexen-1-yl]methyl}piperazine



产品基本信息

属性	值
化学名称	1- {[2-(4-Chlorophenyl)-4,4-dimethyl-1-cyclohexen-1-yl]methyl}piperazine
中文名称	1- {[2-(4-氯苯基)-4,4-二甲基环己-1-烯基]甲基}哌嗪
CAS 号	1228780-72-0
分子式	C ₁₉ H ₂₇ ClN ₂
分子量	318.884
纯度	>96%

产品说明

1-[2-(4-氯苯基)-4,4-二甲基环己-1-烯基]甲基哌嗪产品说明书

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 1-{{2-(4-Chlorophenyl)-4,4-dimethyl-1-cyclohexen-1-yl}methyl}piperazine，分子式 C₁₉H₂₇ClN₂，分子量 318.884，CAS 登记号 1228780-72-0。其结构特征为哌嗪环通过亚甲基连接至含氯苯基及二甲基取代的环己烯骨架，赋予其独特的空间位阻和电子效应。常温下呈白色至类白色结晶粉末，纯度 ≥96% (HPLC 检测)，易溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为哌嗪类衍生物，其结构中的氯苯基和环己烯基团可增强与生物靶点的疏水相互作用，而哌嗪环提供碱性中心，可能参与氢键形成或质子化过程。此类结构常见于药物先导化合物设计，尤其在神经递质调节剂或 GPCR (G 蛋白偶联受体) 配体开发中具有潜在价值。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域：

- (1) 作为中间体用于合成抗抑郁、抗焦虑等中枢神经系统药物；
- (2) 在激酶抑制剂或抗菌剂开发中作为结构模块；
- (3) 科研用途，如受体结合实验或构效关系研究。

4. 储存条件与使用建议

储存于 -20°C 至 4°C 避光干燥环境，密封保存于惰性气体 (如氮气) 中以减少氧化。开封后建议分装使用，避免反复冻融。实验操作需在通风橱中进行，佩戴防护手套及护目镜。溶解时优先选用 DMSO 配制母液，后续用缓冲液稀释至工作浓度。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC、NMR 及质谱验证结构，批次间一致性可控。安全数据：急性毒性 (大鼠口服 LD₅₀) 尚未完全表征，操作时需遵循 GHS 分类 (疑似 H302 吞咽有害)。废

弃物处置应参照当地法规，不可直接排入下水道。如接触皮肤，立即用大量清水冲洗并就医。

注：本说明仅限科研用途，不适用于诊断或治疗人类疾病。具体应用需进一步验证合规性。