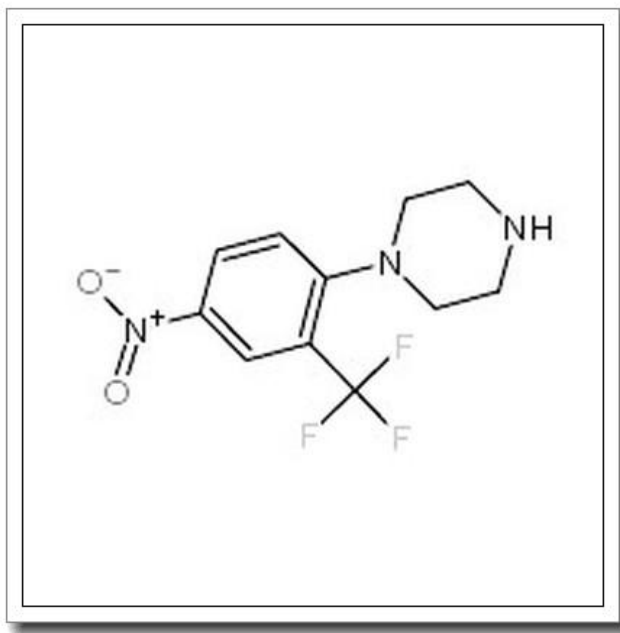


1-(4-硝基-2-三氟甲基苯基)-哌嗪

1-[4-nitro-2-(trifluoromethyl)phenyl]piperazine



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-[4-nitro-2-(trifluoromethyl)phenyl]piperazine
中文名称	1-(4-硝基-2-三氟甲基苯基)-哌嗪
CAS 号	381242-61-1
分子式	C ₁₁ H ₁₂ F ₃ N ₃ O ₂
分子量	275.227
纯度	>96%

产品说明

1-[4-硝基-2-(三氟甲基)苯基]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-[4-nitro-2-(trifluoromethyl)phenyl]piperazine，中文系统命名为 1-(4-硝基-2-三氟甲基苯基)-哌嗪，CAS 登记号 381242-61-1。其分子式为 C₁₁H₁₂F₃N₃O₂，分子量 275.227，外观通常为白色至淡黄色结晶粉末，纯度经 HPLC 验证 ≥96%。该化合物结构中含硝基、三氟甲基及哌嗪环，赋予其独特的电子效应和空间位阻特性，在极性有机溶剂（如甲醇、DMSO）中具有良好溶解性。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌嗪类衍生物，该分子可通过哌嗪氮原子与生物靶标（如 GPCRs 或酶活性位点）形成氢键相互作用，其硝基与三氟甲基的强吸电子特性可调节苯环电子云密度，增强与受体的结合选择性。在药物化学中，此类结构常作为中枢神经系统药物或抗菌剂的中间体，尤其适用于开发具有高血脑屏障穿透性的活性分子。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域：

- 医药研发：作为 α-肾上腺素受体调节剂或 5-HT 受体配体的关键合成砌块
- 农药化学：用于构建含氟杂环类杀虫剂的活性核心结构
- 材料科学：作为含氟液晶材料的改性单体

典型实验用途包括：

- 1) 通过亲核取代反应构建杂环体系
- 2) 作为荧光探针的硝基还原位点
- 3) 在钯催化偶联反应中作为芳基化试剂

4. 储存条件与使用建议

储存条件：需避光密封保存于 -20℃ 惰性环境（推荐充氮保护），长期存放建议使用琥珀色玻璃瓶。开封后需在干燥器中平衡至室温再使用，避免吸湿。

使用建议:

- 溶解时建议先用少量 DMSO 助溶, 再稀释至目标浓度
- 实验操作应在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤
- 与强氧化剂分开存放

5. 质量控制与安全信息

质量控制: 每批次提供 COA (质量分析证书), 包含 HPLC 纯度、水分含量 (Karl Fischer 法)、残留溶剂 (GC-MS) 等数据。

安全信息:

- GHS 分类: 皮肤刺激 (Category 2)、眼睛刺激 (Category 2A)
- 防护措施: 佩戴护目镜、丁腈手套及防尘口罩
- 应急处理: 皮肤接触时立即用大量清水冲洗 15 分钟
- 废弃物处置: 按危险有机废物处理, 不可直接排入下水道

注: 本产品仅限科研用途, 不适用于临床或食品应用。具体实验方案需结合文献方法优化。