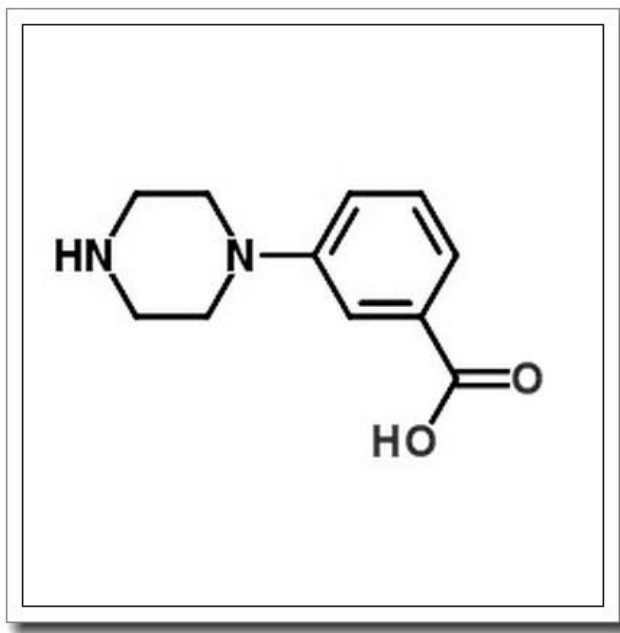


3-(1-哌嗪基)苯甲酸

3-(Piperazin-1-yl)benzoic Acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-(Piperazin-1-yl)benzoic Acid
中文名称	3-(1-哌嗪基)苯甲酸
CAS 号	446831-28-3
分子式	C ₁₁ H ₁₄ N ₂ O ₂
分子量	206.241
纯度	>96%

产品说明

3-(1-哌嗪基)苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

3-(1-哌嗪基)苯甲酸 (英文名称: 3-(Piperazin-1-yl)benzoic Acid) 是一种有机化合物, 化学式为 $C_{11}H_{14}N_2O_2$, 分子量为 206.241, CAS 号为 446831-28-3。该化合物由苯甲酸骨架与哌嗪基团通过碳氮键连接而成, 呈现白色至类白色结晶粉末形态。其纯度标准高于 96%, 具有良好的溶解性, 可溶于多种有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌嗪衍生物, 该化合物在药物化学和生物化学中具有重要价值。哌嗪基团赋予其碱性特征和配位能力, 使其能够与生物分子如蛋白质或核酸发生相互作用。苯甲酸结构则提供了羧酸官能团, 便于进一步衍生化或作为氢键供体/受体。这种双重特性使其成为药物设计中的关键中间体, 尤其在调节受体亲和力和优化药代动力学性质方面表现突出。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于医药研发和有机合成领域。在药物化学中, 常用于构建中枢神经系统药物 (如抗抑郁剂、抗精神病药物) 的活性分子骨架。此外, 它可作为激酶抑制剂或 GPCR 调节剂的合成前体。在材料科学中, 其刚性-柔性结合的分子结构可用于设计功能化高分子或金属有机框架 (MOFs)。具体实验用途包括但不限于: 体外活性筛选、结构-活性关系 (SAR) 研究以及放射性标记探针的制备。

4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光条件下储存, 温度控制在 $2-8^{\circ}C$, 长期保存需置于惰性气体环境中。开封后应尽快使用, 剩余产品需密封保存以避免吸湿。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解时建议先使用少量 DMSO 助溶, 再用缓冲液稀释至工作浓度。注意避免与强氧化剂接触, 防止分解反应发生。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确认纯度 >96%，批次间一致性误差 <2%。核磁共振（¹H NMR）和质谱（MS）用于结构验证。安全数据表明，该化合物可能引起眼睛和皮肤刺激，操作时应遵循 GHS 标准，危险代码为 H315-H319。如发生接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地化学品管理法规，不可直接排入下水道。

（注：本说明基于当前研究数据编制，具体应用需结合实验条件优化。产品规格以实际检测报告为准。）