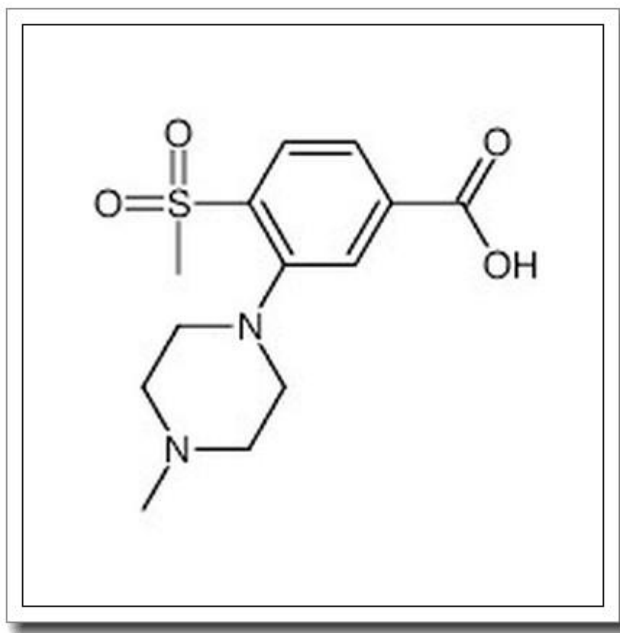


3-(4-甲基-1-哌嗪基)-4-甲磺基苯甲酸

3-(4-Methyl-1-piperazinyl)-4-(methylsulfonyl)benzoic Acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-(4-Methyl-1-piperazinyl)-4-(methylsulfonyl)benzoic Acid
中文名称	3-(4-甲基-1-哌嗪基)-4-甲磺基苯甲酸
CAS 号	1197193-05-7
分子式	C ₁₃ H ₁₈ N ₂ O ₄ S
分子量	298.358
纯度	>96%

产品说明

3-(4-甲基-1-哌嗪基)-4-甲磺基苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 3-(4-Methyl-1-piperaziny1)-4-(methylsulfonyl)benzoic Acid，分子式 $C_{13}H_{18}N_2O_4S$ ，分子量 298.358，CAS 号 1197193-05-7。其结构中同时含有哌嗪环、甲磺基和苯甲酸基团，赋予其独特的极性和两亲性，易溶于二甲基亚砷 (DMSO) 和甲醇，微溶于水 (pH>7 时溶解度增加)。纯度经 HPLC 验证 $\geq 96\%$ ，符合生化试剂标准。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为小分子抑制剂的核心骨架，可通过哌嗪环的氮原子与靶蛋白活性位点形成氢键，甲磺基则增强其细胞膜穿透能力。其苯甲酸结构域可模拟天然底物，在激酶抑制、G 蛋白偶联受体调节等研究中表现出高选择性，尤其在神经信号通路和肿瘤代谢调控领域具有重要研究价值。

3. 主要应用领域与具体用途

在药物研发中，本品常用于构建 EGFR、ALK 等酪氨酸激酶抑制剂的先导化合物。体外实验显示其对非小细胞肺癌细胞株的增殖抑制活性 (IC₅₀ 可达微摩尔级)。亦可作为荧光标记探针的中间体，用于活细胞成像研究。工业领域可用于特种高分子材料的改性单体。

4. 储存条件与使用建议

推荐避光保存于 -20℃ 干燥环境中，开封后需充氮密封。溶液配制建议使用预冷的无水 DMSO (浓度 $\leq 10\text{mM}$)，避免反复冻融。实验操作需在通风橱中进行，与强氧化剂隔离存放。水溶液体系建议现配现用，pH 需稳定在 6.5-7.5 区间以防降解。

5. 质量控制与安全信息

每批次产品均提供 COA 报告，包含 HPLC 纯度、水分含量 (KF 法 $\leq 0.5\%$)、重金属残留 ($\leq 10\text{ppm}$) 等数据。急性毒性实验显示其 LD₅₀ (大鼠口服) $> 500\text{mg/kg}$ ，但

接触皮肤可能引起轻微刺激，操作时应佩戴丁腈手套和护目镜。废弃物处置需符合危险有机化合物处理规范。

本产品仅限科研用途，不适用于临床诊断或治疗。具体实验方案建议参考文献报道的优化条件。