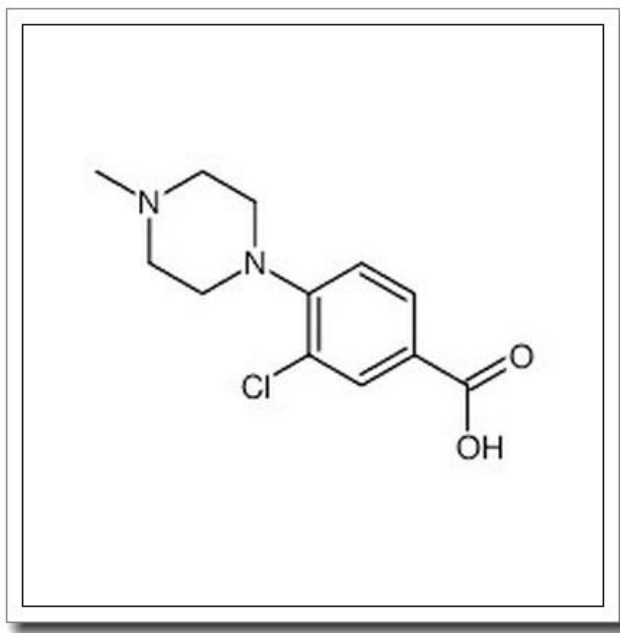


3-氯-4-(4-甲基-1-哌嗪)苯甲酸

3-chloro-4-(4-methylpiperazin-1-yl)benzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-chloro-4-(4-methylpiperazin-1-yl)benzoic acid
中文名称	3-氯-4-(4-甲基-1-哌嗪)苯甲酸
CAS 号	1197193-33-1
分子式	C ₁₂ H ₁₅ ClN ₂ O ₂
分子量	254.713
纯度	>96%

产品说明

3-氯-4-(4-甲基-1-哌嗪)苯甲酸产品说明

1. 产品概述与化学特性

3-氯-4-(4-甲基-1-哌嗪)苯甲酸 (英文名称: 3-chloro-4-(4-methylpiperazin-1-yl)benzoic acid) 是一种有机化合物, CAS 号为 1197193-33-1, 分子式为 $C_{12}H_{15}ClN_2O_2$, 分子量为 254.713。该化合物为白色至类白色固体, 纯度高于 96%, 具有苯甲酸骨架结构, 哌嗪环上的甲基和苯环上的氯原子赋予其独特的化学性质。其溶解性表现为微溶于水, 易溶于有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是一种重要的医药中间体, 其结构中的哌嗪环和苯甲酸基团使其在药物分子设计中具有广泛的应用潜力。哌嗪环常作为药效团出现在多种生物活性分子中, 能够增强化合物的水溶性和靶标结合能力。氯原子的引入可调节分子的电子分布和空间位阻, 从而影响其与生物靶点的相互作用。

3. 主要应用领域与具体用途

3-氯-4-(4-甲基-1-哌嗪)苯甲酸主要用于药物研发领域, 特别是在抗肿瘤、抗感染和中枢神经系统药物的合成中作为关键中间体。其结构特性使其可用于构建更复杂的药物分子, 例如激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂。此外, 该化合物也可用于生化研究中的分子探针设计和作用机制研究。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于干燥、避光的环境中, 储存温度为 2-8°C, 长期保存需充入惰性气体 (如氮气) 以保持稳定性。使用前需恢复至室温并充分摇匀。操作时应穿戴防护手套和护目镜, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。溶解时建议使用 DMSO 或乙醇作为溶剂, 并根据实验需求配制适当浓度的溶液。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度 $\geq 96\%$, 并提供详细的质量分析报告 (COA)。其安全性数据表明, 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性, 操作时需在通风橱中

进行。如不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照当地法规处理，避免环境污染。

以上信息仅供参考，具体应用需结合实验需求进一步验证。