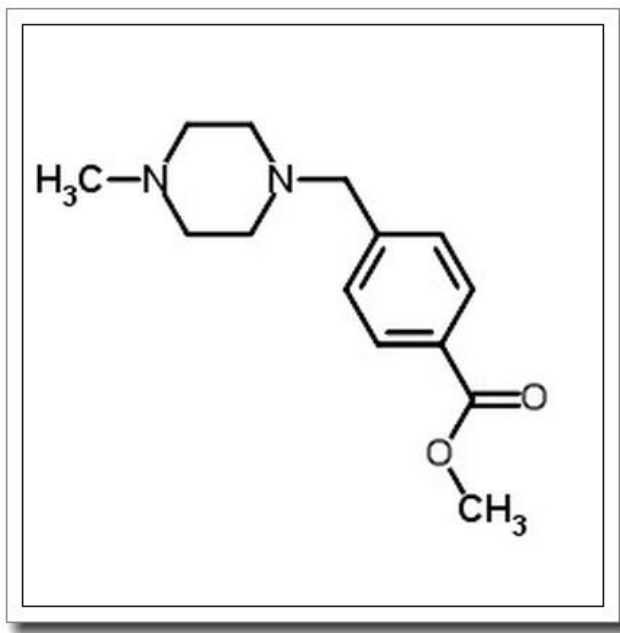


4-[(4-甲基哌嗪-1-基)甲基]苯甲酸甲酯

methyl 4-[(4-methylpiperazin-1-yl)methyl]benzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 4-[(4-methylpiperazin-1-yl)methyl]benzoate
中文名称	4-[(4-甲基哌嗪-1-基)甲基]苯甲酸甲酯
CAS 号	314268-40-1
分子式	C14H20N2O2
分子量	248.321
纯度	>96%

产品说明

4-[(4-甲基哌嗪-1-基)甲基]苯甲酸甲酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 methyl 4-[(4-methylpiperazin-1-yl)methyl]benzoate，分子式 C₁₄H₂₀N₂O₂，分子量 248.321，CAS 号 314268-40-1。其结构中包含苯甲酸甲酯骨架与 4-甲基哌嗪基团，赋予其两亲性特征，易溶于有机溶剂如甲醇、DMSO，微溶于水。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，符合生化试剂标准。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为哌嗪类衍生物，具有显著的生物活性。其分子中的甲基哌嗪基团可增强细胞膜穿透性，而苯甲酸酯结构则提供与靶标蛋白结合的位点。在药物化学中，此类结构常作为激酶抑制剂或受体调节剂的核心片段，尤其在抗肿瘤和中枢神经系统药物研发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药中间体合成，特别适用于蛋白激酶抑制剂（如 EGFR 抑制剂）的构效关系研究。在体外实验中，可用于构建小分子文库，或作为荧光标记物的前体。此外，在材料科学领域，其衍生物可应用于功能化聚合物的制备。

4. 储存条件与使用建议

建议避光密封保存于 -20℃ 干燥环境中，长期储存需充惰性气体保护。使用时需在干燥氮气环境下操作，避免反复冻融。溶解推荐使用无水 DMSO，配制后溶液建议现配现用，剩余溶液需于 -80℃ 分装保存，有效期 6 个月。

5. 质量控制与安全信息

批次纯度经 LC-MS 和核磁共振双重验证，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。本品属于刺激性化学品，操作时需佩戴护目镜及防尘口罩，避免吸入或皮肤接触。如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地危险化学品管理条例。

注：本产品仅限科研用途，不可用于人体或临床诊断。具体实验方案建议参考文献报道的优化条件。