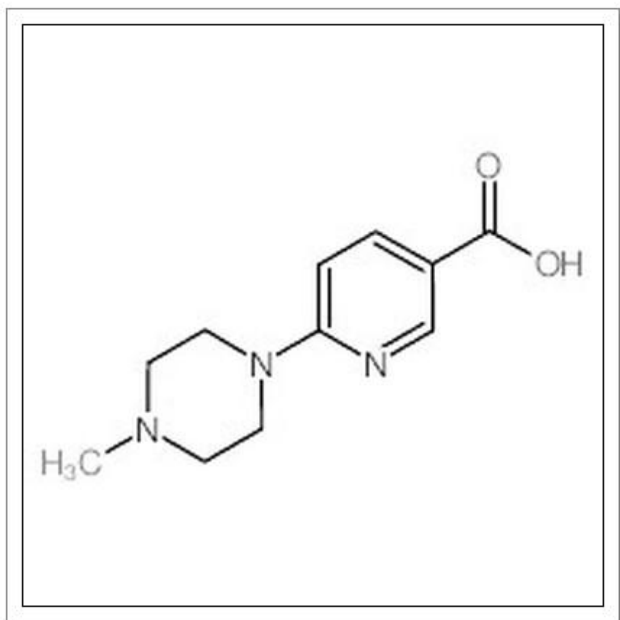


6-(4-甲基-1-哌嗪基)-3-吡啶羧酸

6-(4-methylpiperazin-1-yl)pyridine-3-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	6-(4-methylpiperazin-1-yl)pyridine-3-carboxylic acid
中文名称	6-(4-甲基-1-哌嗪基)-3-吡啶羧酸
CAS 号	132521-70-1
分子式	C ₁₁ H ₁₅ N ₃ O ₂
分子量	221.256
纯度	>96%

产品说明

6-(4-甲基-1-哌嗪基)-3-吡啶羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 6-(4-methylpiperazin-1-yl)pyridine-3-carboxylic acid, 是一种含哌嗪基的吡啶羧酸衍生物。其分子式为 C₁₁H₁₅N₃O₂, 分子量 221.256, CAS 号为 132521-70-1。外观通常为白色至类白色结晶性粉末, 纯度经 HPLC 验证大于 96%。该化合物兼具吡啶环的平面刚性结构和哌嗪基团的柔性特征, 使其在极性有机溶剂 (如 DMSO、甲醇) 中具有中等溶解性, 而在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为杂环化合物, 该分子中的羧酸基团可参与酰胺化等偶联反应, 而哌嗪基团则赋予其碱性特征和氢键结合能力。这种双重功能使其成为药物化学中重要的中间体, 尤其适用于构建靶向 GPCRs (G 蛋白偶联受体) 或激酶的抑制剂。其结构特征有助于增强化合物的细胞膜穿透性和代谢稳定性。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于医药研发领域, 具体包括: 1) 作为小分子抗癌药物或抗感染药物的关键砌块; 2) 用于构建神经递质调节剂的核心结构; 3) 在有机合成中作为多官能团化修饰的起始原料。典型应用案例包括用于蛋白激酶抑制剂的侧链修饰, 以及作为 PET 显影剂的前体化合物。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C、避光、干燥条件下长期储存, 开封后需充惰性气体保护。使用前需平衡至室温以避免吸湿。溶解推荐使用预纯化的 DMSO (浓度 ≤ 50mM), 并避免与强氧化剂接触。实验操作应在通风橱中进行, 建议佩戴丁腈手套和护目镜。

5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱 (MS) 和核磁共振 (NMR) 验证结构, HPLC 检测显示单一主峰。安全数据表明其急性毒性较低 (LD₅₀ 未明确), 但可能对眼睛和呼吸道产生轻微刺激。

激。安全术语 S22 提示勿吸入粉尘, S24/25 要求避免接触皮肤和眼睛。废弃物处置需符合当地危险化学品管理法规。

注: 具体实验用量请参考相关文献, 建议首次使用者进行小规模预实验验证反应条件。