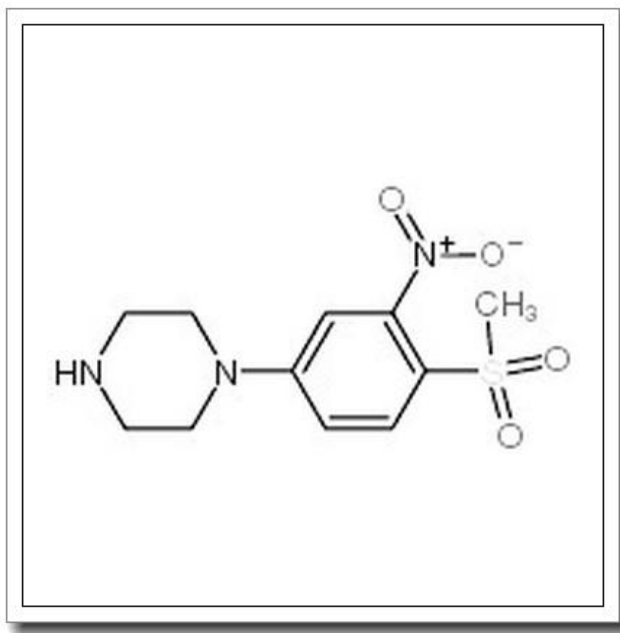


# N-(4-甲磺基-3-硝基苯基)哌嗪

*1-(4-methylsulfonyl-3-nitrophenyl)piperazine*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	1-(4-methylsulfonyl-3-nitrophenyl)piperazine
中文名称	N-(4-甲磺基-3-硝基苯基)哌嗪
CAS 号	1095010-43-7
分子式	C <sub>11</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O <sub>4</sub> S
分子量	285.32
纯度	>96%

## 产品说明

### 1-(4-甲基磺酰基-3-硝基苯基)哌嗪产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 1-(4-methylsulfonyl-3-nitrophenyl)piperazine, 中文名称为 N-(4-甲磺基-3-硝基苯基)哌嗪, CAS 号为 1095010-43-7。其分子式为 C<sub>11</sub>H<sub>15</sub>N<sub>3</sub>O<sub>4</sub>S, 分子量为 285.32, 纯度经高效液相色谱 (HPLC) 测定大于 96%。该化合物为淡黄色至类白色结晶性粉末, 可溶于常见有机溶剂如二甲基亚砷 (DMSO) 和甲醇, 但在水中溶解度较低。结构中的甲磺基与硝基赋予其独特的电子效应, 使其成为有机合成及药物研发中的重要中间体。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为哌嗪类衍生物, 该分子兼具芳香硝基化合物与磺酰基的特性, 可通过亲核取代或还原反应进一步修饰。其结构中的哌嗪环可作为氢键受体, 增强与生物靶标的相互作用, 因此在药物设计中常用于构建中枢神经系统 (CNS) 活性分子或激酶抑制剂。甲磺基的存在可调节化合物的脂溶性和代谢稳定性, 而硝基则可能参与氧化还原相关生物途径。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于医药研发领域, 尤其用于抗抑郁、抗精神病及抗肿瘤药物的先导化合物合成。在农药化学中, 可作为除草剂或杀菌剂的中间体。此外, 在材料科学中可用于制备含氮杂环功能材料。具体实验用途包括:

- 作为多巴胺受体或 5-HT 受体配体的结构单元
- 用于构建含磺酰基的杂环化合物库
- 硝基还原后生成氨基衍生物, 用于偶联反应

#### 4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20° C 至 4° C 的干燥环境中, 避免光照及潮湿。开封后需充惰性气体 (如氮气) 保护以延长稳定性。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套及护目镜。溶解推荐使用无水 DMSO, 配制溶液建议现配现用, 长期储存需分装冻存。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品经核磁共振（NMR）和质谱（MS）验证结构，HPLC 检测显示单一主峰。安全数据表明，其可能对眼睛和皮肤有刺激性，操作时应避免直接接触。如意外吸入或摄入，需立即就医并提供 MSDS 信息。废弃物处理需符合当地危险化学品处置法规。

注：本说明仅限科研用途，不适用于诊断或治疗等医疗行为。