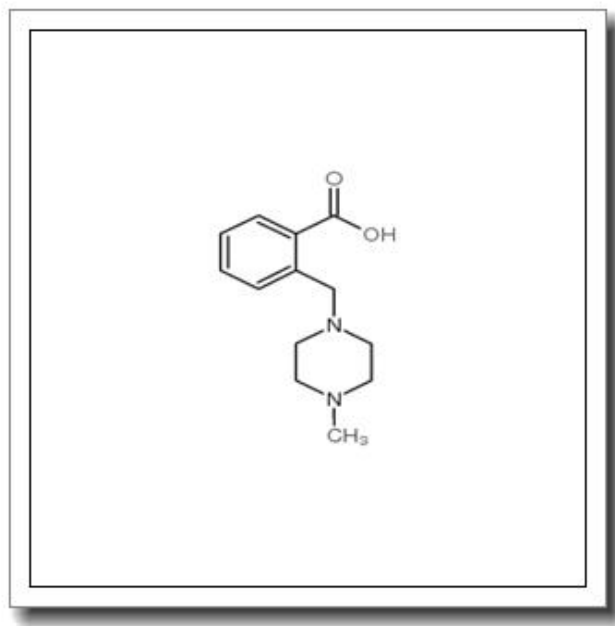


2-(4-甲基哌嗪-1-甲基)苯甲酸

2-(4-Methylpiperazin-1-ylmethyl)benzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(4-Methylpiperazin-1-ylmethyl)benzoic acid
中文名称	2-(4-甲基哌嗪-1-甲基)苯甲酸
CAS 号	514209-40-6
分子式	C13H18N2O2
分子量	234.294
纯度	≥96%

产品说明

2-(4-甲基哌嗪-1-甲基)苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-(4-Methylpiperazin-1-ylmethyl)benzoic acid (CAS 号: 514209-40-6) 是一种有机化合物, 分子式为 $C_{13}H_{18}N_2O_2$, 分子量为 234.294。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 $\geq 96\%$, 兼具苯甲酸骨架与哌嗪甲基结构, 表现出良好的溶解性 (溶于甲醇、乙醇等有机溶剂) 和稳定性。其结构中哌嗪环的碱性氮原子与苯甲酸的羧基共同赋予其独特的化学性质, 适用于多种有机合成与生物化学应用。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为重要的医药中间体, 其哌嗪基团可参与氢键形成和分子识别, 常用于调节药物分子的亲脂性与生物活性。苯甲酸部分则提供羧酸反应位点, 便于进一步衍生化。在药物研发中, 此类结构常见于激酶抑制剂、抗菌剂及中枢神经系统药物的设计, 因其能有效优化化合物的药代动力学特性。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于以下领域:

- 医药化学: 作为合成抗肿瘤、抗感染或神经活性药物的关键中间体。
- 材料科学: 用于功能化高分子材料的改性或配位聚合物的制备。
- 科研实验: 在酶学或受体研究中作为小分子探针或结构修饰模板。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于干燥、避光环境中, 温度控制在 $2-8^{\circ}\text{C}$ 以延长稳定性。开封后需充惰性气体保护, 避免吸湿或氧化。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套与护目镜。溶解推荐使用无水 DMF 或 DMSO, 避免与强氧化剂直接接触。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$, 并提供 COA (质量分析证书)。其急性毒性数据为 LD₅₀ (大鼠口服) >500 mg/kg, 属于低毒类化合物, 但长期接触可能刺激皮肤或黏膜。废弃处理需遵循当地化学品管理法规, 不可直接排放至环境中。

(注: 以上信息基于实验室数据, 实际应用前请查阅最新文献或进行小试验证。)