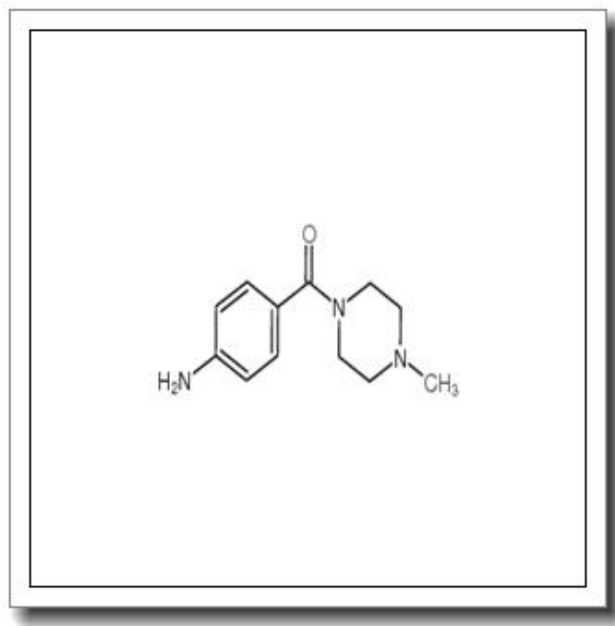


4-[(4-甲基-1-哌嗪基)羰基]苯胺

(4-Aminophenyl) (4-methylpiperazin-1-yl)methanone



产品基本信息

属性	值
化学名称	(4-Aminophenyl) (4-methylpiperazin-1-yl)methanone
中文名称	4-[(4-甲基-1-哌嗪基)羰基]苯胺
CAS 号	55121-99-8
分子式	C ₁₂ H ₁₇ N ₃ O
分子量	219.283
纯度	≥96%

产品说明

4-[(4-甲基-1-哌嗪基)羰基]苯胺产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为(4-Aminophenyl) (4-methylpiperazin-1-yl)methanone, CAS 号为 55121-99-8, 分子式 C₁₂H₁₇N₃O, 分子量 219.283, 是一种白色至淡黄色结晶粉末。其结构中同时含有苯胺基团和 4-甲基哌嗪基团, 赋予其独特的亲水性与碱性特征。纯度 ≥96%, 可通过 HPLC 和 NMR 验证。该化合物在常温下稳定, 易溶于有机溶剂如 DMSO 和甲醇, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌嗪类衍生物, 该化合物可通过羰基与氨基的协同作用参与多种生物分子相互作用, 尤其在受体结合和酶抑制研究中表现出活性。其结构中的甲基哌嗪基团可增强细胞膜穿透性, 而苯胺基团则为后续衍生化(如重氮化或酰化)提供反应位点, 是合成药物中间体的关键骨架。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于医药研发和有机合成领域。在药物化学中, 它是构建抗精神病药、抗组胺药及激酶抑制剂的重要中间体。此外, 可用于荧光标记探针的合成, 或作为配体用于金属催化反应。具体实验用途包括但不限于: 体外活性分子筛选、结构-活性关系(SAR)研究以及放射性标记前体的制备。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 2-8°C 干燥避光环境中, 长期储存需充惰性气体保护。开封后需尽快使用, 避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解推荐使用预纯化的 DMSO, 配制溶液建议现配现用, 避免水溶液长期存放。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 GC-MS 和元素分析验证, 批次间纯度差异 <1%。潜在危害包括皮肤刺激(GHS 分类 Category 2)和眼睛损伤(Category 1), 接触后需立即用大量清水冲

洗。安全数据表 (SDS) 包含详细毒理学数据 (LD50 大鼠经口: >500 mg/kg)。废弃物处理需符合当地法规, 建议通过专业化学品回收机构处置。

注: 以上信息基于现有实验数据, 实际应用前请根据具体需求进一步验证。