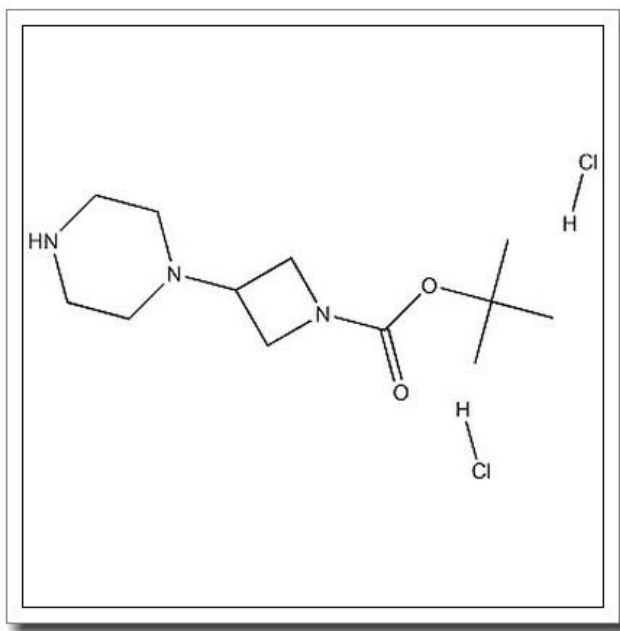


1-叔丁氧羰基-3-(1-哌嗪基)氮杂环丁烷 二盐酸盐

tert-Butyl 3-(piperazin-1-yl)azetidine-1-carboxylate dihydrochloride



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-Butyl 3-(piperazin-1-yl)azetidine-1-carboxylate dihydrochloride
中文名称	1-叔丁氧羰基-3-(1-哌嗪基)氮杂环丁烷二盐酸盐
CAS 号	2061980-49-0
分子式	C ₁₂ H ₂₅ Cl ₂ N ₃ O ₂
分子量	314.2518
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-叔丁氧羰基-3-(1-哌嗪基)氮杂环丁烷二盐酸盐 (tert-Butyl 3-(piperazin-1-yl)azetidine-1-carboxylate dihydrochloride) 是一种有机化合物, CAS 号为 2061980-49-0, 分子式为 $C_{12}H_{25}Cl_2N_3O_2$, 分子量为 314.2518。该化合物为白色至类白色固体, 纯度高于 96%, 具有较好的溶解性, 可溶于水、甲醇等极性溶剂。其结构中的哌嗪基和氮杂环丁烷基团使其在药物化学中具有重要的应用价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是一种重要的医药中间体, 其结构中的哌嗪基和氮杂环丁烷基团是许多生物活性分子的关键药效团。哌嗪基团常参与氢键形成和分子间相互作用, 而氮杂环丁烷则能增强分子的刚性和代谢稳定性。这些特性使其在药物设计中广泛用于优化化合物的药理活性和药代动力学性质。

3. 主要应用领域与具体用途

1-叔丁氧羰基-3-(1-哌嗪基)氮杂环丁烷二盐酸盐主要用于药物研发领域, 特别是在抗肿瘤、抗感染和中枢神经系统药物的合成中作为关键中间体。具体用途包括:

- 作为激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体调节剂的构建模块;
- 用于合成具有哌嗪或氮杂环丁烷结构的候选药物分子;
- 在组合化学和高通量筛选中作为多样化合成的起始原料。

4. 储存条件与使用建议

该化合物应密封保存于干燥、避光的环境中, 推荐储存温度为 2-8° C, 长期储存建议置于惰性气体 (如氮气) 保护下。使用时需在干燥通风的环境中进行, 避免直接接触皮肤和眼睛。溶解时建议使用高纯度溶剂, 并在使用前通过核磁共振

(NMR) 或高效液相色谱 (HPLC) 验证其纯度和稳定性。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测, 纯度 $\geq 96\%$, 并提供详细的质量分析报告 (COA)。安全信息如下:

- 可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性，操作时需佩戴防护手套、护目镜和实验服；
- 避免吸入粉尘或接触皮肤，如不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医；
- 废弃物应按照当地法规处理，不可随意排放。

以上信息仅供参考，具体实验和应用需结合实际情况并遵循相关安全规范。