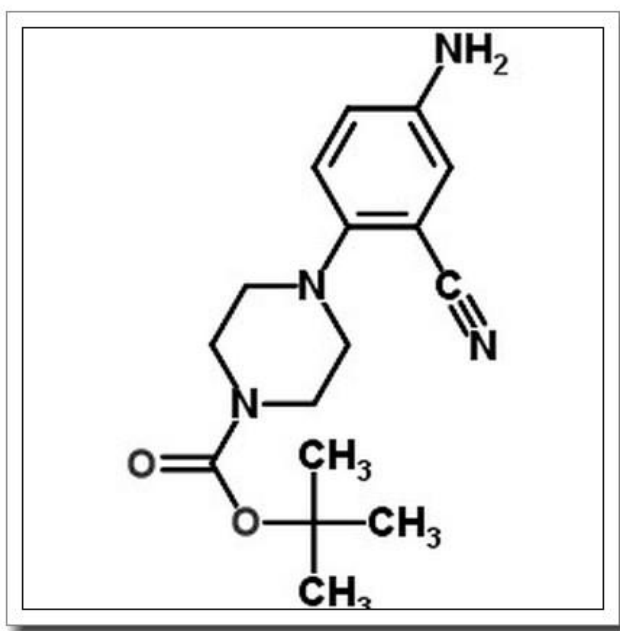


(4-氨基-2-氰基苯基)哌嗪-1-羧酸叔丁酯

tert-butyl 4-(4-amino-2-cyanophenyl)piperazine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl 4-(4-amino-2-cyanophenyl)piperazine-1-carboxylate</i>
中文名称	(4-氨基-2-氰基苯基)哌嗪-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	288251-85-4
分子式	C ₁₆ H ₂₂ N ₄ O ₂
分子量	302.371
纯度	>96%

产品说明

(4-氨基-2-氰基苯基)哌嗪-1-羧酸叔丁酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 tert-butyl 4-(4-amino-2-cyanophenyl)piperazine-1-carboxylate, 中文名称为(4-氨基-2-氰基苯基)哌嗪-1-羧酸叔丁酯, CAS 号为 288251-85-4, 分子式为 C₁₆H₂₂N₄O₂, 分子量为 302.371。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度>96%, 结构中含有氨基、氰基及哌嗪环等活性基团, 具有较高的化学反应活性。其叔丁酯基团可提供良好的稳定性, 适用于多种有机合成反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌嗪类衍生物, 该化合物在药物化学中具有重要地位。其结构中的氨基和氰基可作为关键药效团, 参与氢键形成或与生物靶点结合。哌嗪环的刚性结构有助于优化分子构象, 提升与受体的亲和力。该分子常作为中间体用于构建具有中枢神经系统活性或抗肿瘤活性的化合物, 在创新药物研发中具有广泛潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

- 医药中间体: 用于合成抗抑郁、抗精神病及抗肿瘤药物的关键片段。
- 农药化学: 作为杂环类农药的构建模块, 参与杀虫剂或杀菌剂的开发。
- 科研用途: 在激酶抑制剂或 GPCR 调节剂的研究中作为结构修饰工具分子。

4. 储存条件与使用建议

- 储存条件: 密封保存于-20°C 至 4°C 干燥环境中, 避免光照与潮湿。
- 使用建议: 操作时需在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。建议以惰性气体保护进行长期储存, 开封后需尽快使用。

5. 质量控制与安全信息

- 质量控制: 通过 HPLC 检测纯度>96%, 质谱与核磁共振确认结构。
- 安全信息: 本品可能对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时需佩戴防护手套及护目镜。若不慎接触, 立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。

本产品仅限科研用途，不可用于人体或动物实验。具体应用前请查阅相关文献并评估安全性。