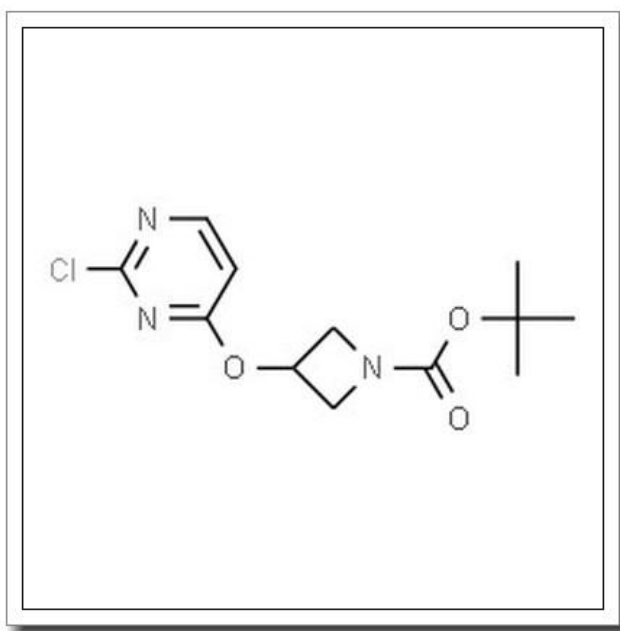


3-((2-氯嘧啶-4-基)氧基)氮杂环丁烷-1-羧酸叔丁酯

tert-butyl 3-(2-chloropyrimidin-4-yloxy)azetidine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 3-(2-chloropyrimidin-4-yloxy)azetidine-1-carboxylate
中文名称	3-((2-氯嘧啶-4-基)氧基)氮杂环丁烷-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	1121633-27-9
分子式	C ₁₂ H ₁₆ ClN ₃ O ₃
分子量	285.73
纯度	>96%

产品说明

产品名称: 3-((2-氯嘧啶-4-基)氧基)氮杂环丁烷-1-羧酸叔丁酯

化学名称: tert-butyl 3-(2-chloropyrimidin-4-yloxy)azetidine-1-carboxylate

CAS 号: 1121633-27-9

分子式: C₁₂H₁₆ClN₃O₃

分子量: 285.73

纯度: >96%

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末, 是一种含氮杂环化合物, 具有嘧啶环和氮杂环丁烷结构。其分子结构中包含氯原子和叔丁氧羰基 (Boc) 保护基, 赋予其良好的反应活性与稳定性。该化合物易溶于有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO)、甲醇和乙腈, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为嘧啶衍生物, 该化合物在药物化学和有机合成中具有重要价值。其嘧啶环可作为氢键受体或供体参与分子间相互作用, 而氯原子为后续亲核取代反应提供了活性位点。Boc 保护基的存在使其在固相合成和多肽修饰中具有广泛应用潜力。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药中间体合成, 特别是在激酶抑制剂和抗肿瘤药物的研发中。其可作为关键骨架用于构建 EGFR、CDK 等靶点的小分子抑制剂。此外, 在农药化学领域, 该化合物也可用于新型杀虫剂或杀菌剂的前体合成。

4. 储存条件与使用建议

建议在-20° C 下避光干燥储存, 长期保存需充惰性气体保护。使用前需恢复至室温并避免反复冻融。操作时应在通风橱中进行, 佩戴防护手套和护目镜。溶解建议使用无水级有机溶剂, 并避免与强氧化剂接触。

5. 质量控制与安全信息

本品通过 HPLC 检测纯度>96%，并提供完整的 COA（质量分析证书）。其急性毒性数据为 LD₅₀>500 mg/kg（大鼠，口服），属于刺激性化学品。如接触皮肤或眼睛，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地环保法规，建议通过专业化学品回收机构处置。

注：本产品仅限科研用途，不可用于人体或动物实验。具体应用前请查阅最新文献并开展安全性评估。