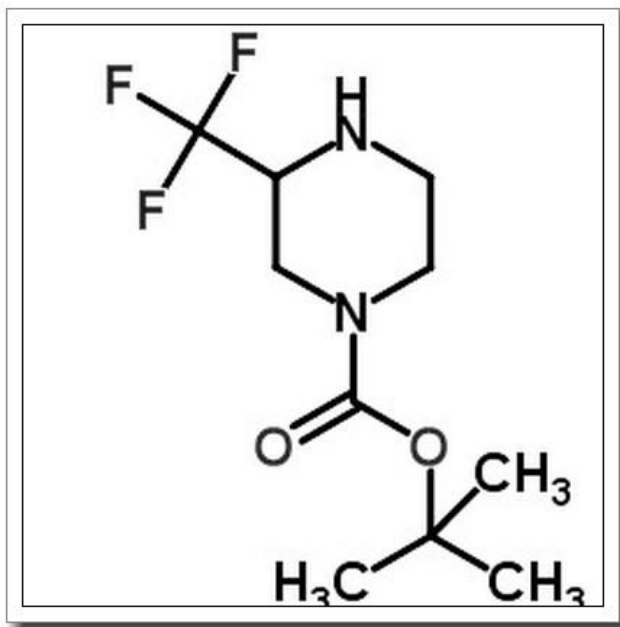


## 3-(三氟甲基)哌嗪-1-羧酸叔丁酯

*tert-butyl 3-(trifluoromethyl)piperazine-1-carboxylate*



### 产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl 3-(trifluoromethyl)piperazine-1-carboxylate</i>
中文名称	3-(三氟甲基)哌嗪-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	886779-69-7
分子式	C <sub>10</sub> H <sub>17</sub> F <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	254.249
纯度	>96%

## 产品说明

3-(三氟甲基)哌嗪-1-羧酸叔丁酯 (tert-butyl 3-(trifluoromethyl)piperazine-1-carboxylate) 是一种重要的含氟哌嗪类化合物, CAS 号为 886779-69-7, 分子式为 C<sub>10</sub>H<sub>17</sub>F<sub>3</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, 分子量为 254.249。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 纯度通常大于 96%, 具有较高的化学稳定性和良好的溶解性, 可溶于多种有机溶剂如二氯甲烷、乙醇和乙酸乙酯等。其结构中的叔丁氧羰基 (Boc) 保护基和三氟甲基官能团使其在有机合成中具有独特的反应活性。

### 1. 生物化学功能与重要性

该化合物作为哌嗪类衍生物, 在药物化学和生物化学领域具有广泛的应用价值。哌嗪环是许多生物活性分子的核心结构, 而三氟甲基的引入可显著改善化合物的脂溶性、代谢稳定性和生物利用度。Boc 保护基的存在使其易于在后续反应中脱保护, 从而进一步修饰哌嗪环, 为药物分子设计提供灵活的合成路径。

### 2. 主要应用领域与具体用途

3-(三氟甲基)哌嗪-1-羧酸叔丁酯主要用于医药中间体的合成, 特别是在抗肿瘤、抗病毒和中枢神经系统药物的研发中。其可作为关键砌块用于构建含哌嗪结构的活性分子, 例如激酶抑制剂和 G 蛋白偶联受体 (GPCR) 调节剂。此外, 该化合物还可用于材料科学领域, 作为含氟功能材料的合成前体。

### 3. 储存条件与使用建议

建议将本品置于干燥、阴凉的环境中, 避免光照和潮湿, 储存温度以 2-8°C 为宜。开封后需充入惰性气体 (如氮气) 保护, 并密封保存。使用时需在通风良好的条件下操作, 避免直接接触皮肤和眼睛。建议佩戴防护手套、护目镜和实验服, 以减少暴露风险。

### 4. 质量控制与安全信息

本品的质量控制通过高效液相色谱 (HPLC) 和核磁共振 (NMR) 进行验证, 确保纯度大于 96%。安全信息方面, 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性, 操作

时应遵循化学品通用防护措施。如不慎接触，应立即用大量清水冲洗，并寻求医疗帮助。废弃物处理需符合当地环保法规，避免对环境造成污染。