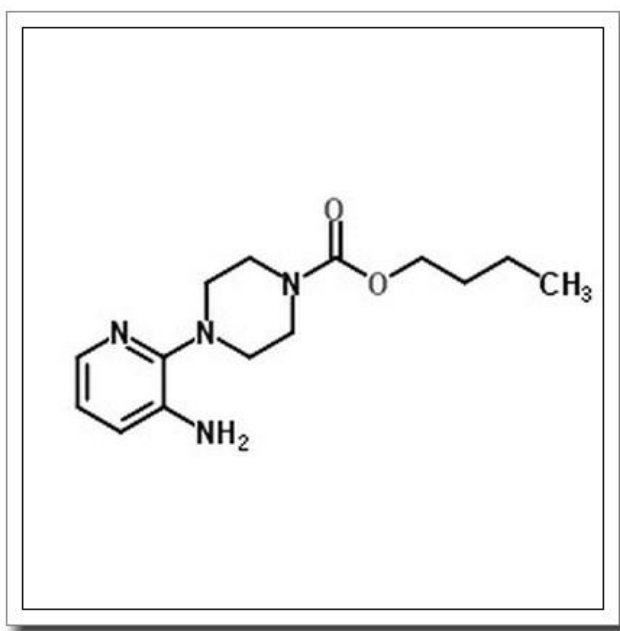


3-氨基-2-[4-叔丁氧基羰基(哌嗪基)]吡啶

tert-butyl 4-(3-aminopyridin-2-yl)piperazine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 4-(3-aminopyridin-2-yl)piperazine-1-carboxylate
中文名称	3-氨基-2-[4-叔丁氧基羰基(哌嗪基)]吡啶
CAS 号	111669-25-1
分子式	C ₁₄ H ₂₂ N ₄ O ₂
分子量	278.35
纯度	>96%

产品说明

以下是符合要求的专业产品说明:

产品名称: 3-氨基-2-[4-叔丁氧基羰基(哌嗪基)]吡啶 (tert-butyl 4-(3-aminopyridin-2-yl)piperazine-1-carboxylate)

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶粉末, 化学式为 C₁₄H₂₂N₄O₂, 分子量 278.35, CAS 登记号 111669-25-1。结构中同时含有氨基吡啶和 Boc 保护的哌嗪基团, 使其兼具芳香胺的反应活性和仲胺的保护特性。该化合物在常温下稳定, 易溶于二氯甲烷、DMF 等有机溶剂, 微溶于水。纯度经 HPLC 检测确认 ≥96%, 符合医药中间体的质量标准要求。

2. 生物化学功能与重要性

作为重要的杂环化合物, 其分子中的氨基吡啶结构可参与氢键形成, 而 Boc 保护的哌嗪基团在酸性条件下可脱保护生成活性仲胺。这种双重功能特性使其成为构建药物分子的关键砌块, 特别是在激酶抑制剂和中枢神经系统药物的研发中具有不可替代的作用。该化合物的高反应选择性为复杂分子的模块化合成提供了重要途径。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于以下领域: 一是作为抗肿瘤药物 (如 CDK 抑制剂) 的合成中间体; 二是用于神经递质调节剂的结构修饰; 三是在 PET 示踪剂开发中作为前体化合物。具体应用中, 常用于 Suzuki 偶联、Buchwald-Hartwig 胺化等交叉偶联反应, 也可作为蛋白质激酶结合位点的模拟结构单元。

4. 储存条件与使用建议

建议在 2-8°C 惰性气体 (如氩气) 保护下避光保存, 长期储存需置于干燥器中。开封后建议一次性使用完毕, 若需分次使用, 应严格隔绝空气和湿气。使用前需室温平衡 30 分钟, 称量操作应在干燥环境下进行。反应投料时建议先进行 Boc 基团的脱保护处理, 以获得更高反应活性。

5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱（MS）、核磁（¹H NMR）和元素分析（EA）三重确证，批次间质量稳定。安全数据表明该物质可能引起眼睛和皮肤刺激，操作时应佩戴防护眼镜和丁腈手套。如接触皮肤，应立即用大量清水冲洗至少 15 分钟。废弃物处理需符合当地危险化学品处置法规，建议采用专业化学品回收公司处理。