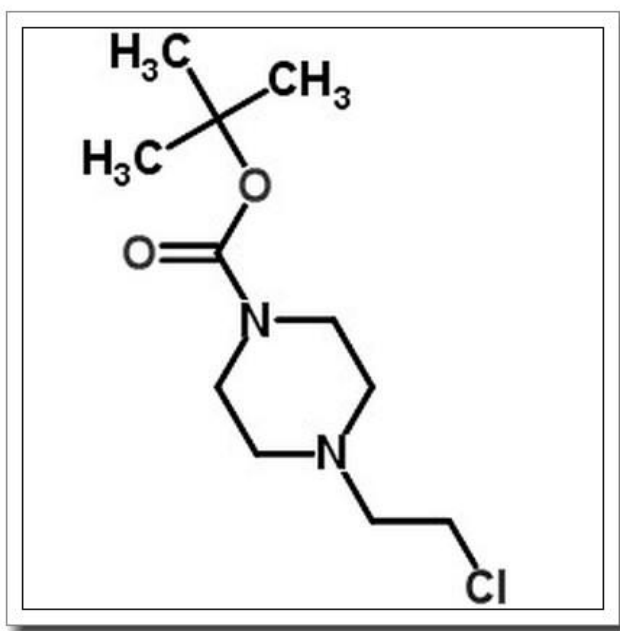


# 4-(2-氯乙基)四氢-1(2H)-吡嗪羧酸叔丁酯

*tert-butyl 4-(2-chloroethyl)piperazine-1-carboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 4-(2-chloroethyl)piperazine-1-carboxylate
中文名称	4-(2-氯乙基)四氢-1(2H)-吡嗪羧酸叔丁酯
CAS 号	208167-83-3
分子式	C <sub>11</sub> H <sub>21</sub> ClN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	248.75
纯度	>96%

## 产品说明

### 4-(2-氯乙基)四氢-1(2H)-吡嗪羧酸叔丁酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 tert-butyl 4-(2-chloroethyl)piperazine-1-carboxylate, 是一种重要的有机合成中间体, CAS 号为 208167-83-3。其分子式为 C<sub>11</sub>H<sub>21</sub>ClN<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, 分子量为 248.75, 纯度高于 96%。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 具有典型的叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团特征, 同时含有活性氯乙基官能团, 易于进一步衍生化反应。

#### 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关键作用。其结构中的 Boc 保护基可选择性脱除, 而氯乙基侧链可通过亲核取代反应引入多种功能基团。这种双重反应活性使其成为构建复杂分子 (如抗肿瘤剂、神经递质调节剂) 的核心骨架, 尤其在蛋白激酶抑制剂和 GPCR 靶向药物的研发中应用广泛。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于以下领域:

- 医药研发: 作为小分子抑制剂的关键中间体, 用于合成抗肿瘤、抗抑郁及抗炎药物
- 材料科学: 制备功能化高分子材料的单体前体
- 农药化学: 合成具有生物活性的哌嗪类化合物

典型反应包括 Boc 基团的酸解保护、氯乙基的胺化或醚化反应, 以及作为亲电试剂参与碳-氮键形成反应。

#### 4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 置于-20℃至 4℃干燥避光环境, 惰性气体保护可延长稳定性。使用前需恢复至室温并避免吸湿。建议在通风橱中操作, 接触时佩戴防化手套及护目镜。溶解性测试表明易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 微溶于水 (<0.1 g/L)。

## 5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ ，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。MS 和 NMR 谱图提供结构确证。安全数据：急性毒性（口服 LD50 大鼠） $>500$  mg/kg，皮肤刺激类别 3。废弃物处理需符合危险化学品处置规范，避免与强氧化剂接触。详细安全信息请参阅随附的 SDS 文件。

本产品仅供科研用途，不适用于诊断或治疗应用。使用者应具备有机合成实验技能并遵守实验室安全规程。