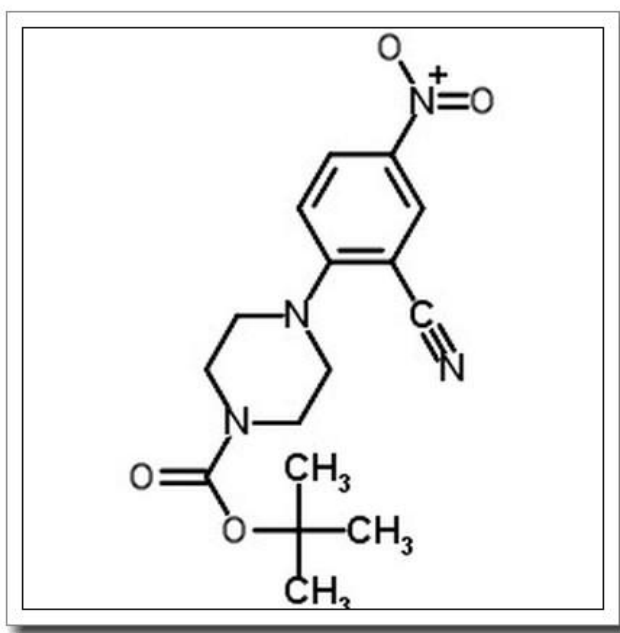


# 4-(2-氰基-4-硝基苯基)哌嗪-1-羧酸叔丁酯

*tert-butyl 4-(2-cyano-4-nitrophenyl)piperazine-1-carboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl 4-(2-cyano-4-nitrophenyl)piperazine-1-carboxylate</i>
中文名称	4-(2-氰基-4-硝基苯基)哌嗪-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	288251-87-6
分子式	C <sub>16</sub> H <sub>20</sub> N <sub>4</sub> O <sub>4</sub>
分子量	332.354
纯度	>96%

## 产品说明

### 4-(2-氰基-4-硝基苯基)哌嗪-1-羧酸叔丁酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 tert-butyl 4-(2-cyano-4-nitrophenyl)piperazine-1-carboxylate，是一种高纯度有机化合物，CAS 号为 288251-87-6。其分子式为 C<sub>16</sub>H<sub>20</sub>N<sub>4</sub>O<sub>4</sub>，分子量为 332.354，纯度经 HPLC 验证大于 96%。该化合物为白色至淡黄色结晶性粉末，具有哌嗪环与氰基、硝基苯基的协同结构，在极性有机溶剂如 DMSO、甲醇中溶解性良好，但在水中溶解度较低。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为哌嗪类衍生物，该化合物因其独特的电子效应和空间位阻，在药物化学中常作为关键中间体。氰基与硝基的强吸电子特性使其易于参与亲核取代反应，而叔丁氧羰基（Boc）保护基团可选择性脱除，为后续结构修饰提供灵活性。其在激酶抑制剂、抗肿瘤药物及神经递质调节剂的研发中具有重要价值。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发领域，具体包括：1) 作为蛋白激酶抑制剂的合成前体；2) 用于构建含哌嗪骨架的候选药物分子；3) 在荧光标记探针开发中作为连接模块。此外，其硝基可还原为氨基，进一步拓展衍生化应用，例如用于偶联抗体或生物素化反应。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在-20℃下避光密封保存，长期储存需充入惰性气体（如氮气）以保持稳定性。使用前需恢复至室温并避免反复冻融。实验操作应在通风橱中进行，佩戴防护手套及护目镜。溶解时推荐使用无水 DMSO，配制成 10-50 mM 储备液，分装后于-80℃保存以避免水解。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱（MS）和核磁共振（NMR）验证结构，HPLC 检测显示单一主峰。安全数据表明，其急性毒性（LD<sub>50</sub>）为大鼠经口>500 mg/kg，但氰基分解可能释放微量

氰化氢，故需避免与强酸或高温接触。废弃物处理应遵守当地法规，建议通过专业化学废弃物回收机构处置。

注：以上信息基于现有实验数据，具体应用需用户进一步验证。技术咨询请联系专业化学品供应商或研发团队。