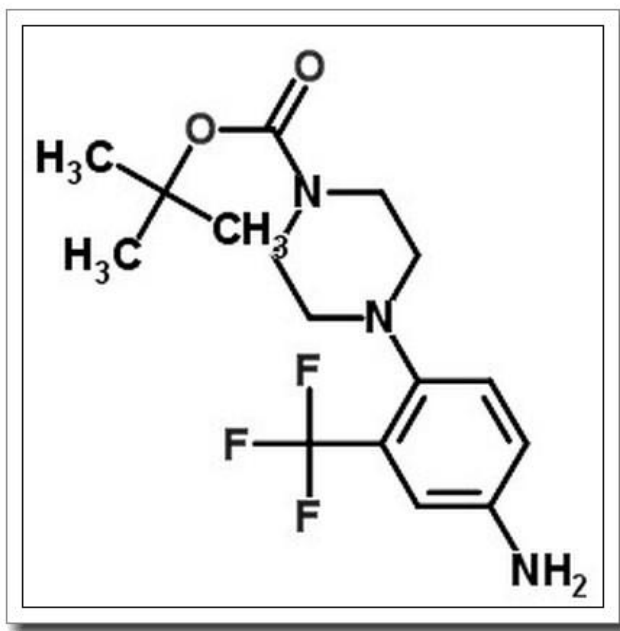


# 4-(4-氨基-2-三氟甲基苯基)-哌嗪-1-羧酸叔丁酯

*tert-butyl 4-[4-amino-2-(trifluoromethyl)phenyl]piperazine-1-carboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl 4-[4-amino-2-(trifluoromethyl)phenyl]piperazine-1-carboxylate</i>
中文名称	4-(4-氨基-2-三氟甲基苯基)-哌嗪-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	193902-87-3
分子式	C <sub>16</sub> H <sub>22</sub> F <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>
分子量	345.36
纯度	>96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

4-(4-氨基-2-三氟甲基苯基)-哌嗪-1-羧酸叔丁酯 (CAS 号: 193902-87-3) 是一种有机化合物, 分子式为  $C_{16}H_{22}F_3N_3O_2$ , 分子量为 345.36。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度通常高于 96%。其结构中含有哌嗪环和叔丁氧羰基 (Boc) 保护基, 以及一个三氟甲基取代的苯胺基团, 这些官能团赋予其独特的化学稳定性和反应活性。该化合物在有机合成中常用于中间体的制备, 尤其在药物化学领域具有重要价值。

### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为哌嗪类衍生物, 其结构中的氨基和哌嗪环使其成为多种生物活性分子的关键中间体。三氟甲基的引入可增强化合物的脂溶性和代谢稳定性, 因此在药物设计中常用于优化先导化合物的药代动力学性质。此外, Boc 保护基的存在使其在 多步合成中易于脱保护和进一步功能化, 广泛应用于小分子抑制剂和受体配体的合成。

### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发和有机合成领域, 具体用途包括:

- 作为中间体用于合成抗肿瘤、抗抑郁或抗精神病药物的活性成分;
- 用于构建含哌嗪结构的化合物库, 支持高通量筛选和药物发现;
- 在材料科学中用于制备功能性高分子或配位化合物。

### 4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于干燥、避光的环境中, 储存温度控制在  $2-8^{\circ}C$  以保持稳定性。开封后需密封保存, 避免吸湿或氧化。使用时应在惰性气体 (如氮气) 保护下操作, 避免与强酸、强碱或氧化剂接触。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇, 但在水中溶解度较低。

### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过高效液相色谱 (HPLC) 检测, 纯度  $\geq 96\%$ 。使用时需穿戴适当的个人防

护装备（如手套、护目镜和实验服），避免直接接触皮肤或吸入粉尘。若不慎接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照当地法规处理，不可随意排放。

以上信息仅供参考，具体实验条件需根据实际需求调整。如需进一步技术支持，请联系专业化学品供应商或研发团队。