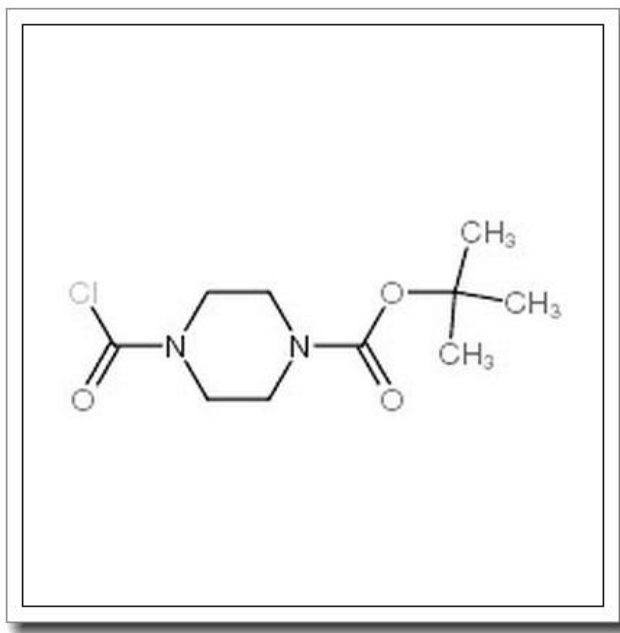


4-氯羰基-哌嗪-1-羧酸叔丁酯

tert-butyl 4-carbonochloridoylpiperazine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 4-carbonochloridoylpiperazine-1-carboxylate
中文名称	4-氯羰基-哌嗪-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	59878-28-3
分子式	C ₁₀ H ₁₇ ClN ₂ O ₃
分子量	248.707
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 4-氯羰基-哌嗪-1-羧酸叔丁酯 (tert-butyl 4-carbonochloridoylpiperazine-1-carboxylate)，CAS 号 59878-28-3，分子式 C₁₀H₁₇ClN₂O₃，分子量 248.707。纯度经 HPLC 测定大于 96%，具有典型酰胺键和羧酸酯基团的红外特征吸收峰。该化合物在常温下稳定，易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂，微溶于水，熔点为 98-102℃。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌嗪类衍生物，其结构中的氯羰基 (-COCl) 具有高反应活性，可与氨基、羟基等亲核基团发生酰化反应，是构建复杂有机分子（如药物中间体）的关键官能团。叔丁氧羰基 (Boc) 保护基的存在使其在固相合成和多肽修饰中具有重要价值，能有效避免副反应并提高产物收率。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药研发和精细化工领域，具体包括：

- 1) 抗肿瘤药物及抗生素中间体的合成
- 2) 多肽类化合物的保护与活化
- 3) 作为有机催化剂或配体参与不对称合成
- 4) 高分子材料功能化改性

4. 储存条件与使用建议

建议在-20℃下密封避光保存，开封后需充惰性气体保护。使用时应于干燥环境中操作，避免接触水分或强氧化剂。溶解性测试表明，推荐使用无水二氯甲烷作为反应溶剂，反应温度宜控制在 0-25℃以确保活性基团稳定性。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过核磁共振 (1H NMR、13C NMR) 和质谱 (MS) 进行结构确证，HPLC 检测显示单一主峰。安全数据表明，其具有刺激性，操作时需佩戴防护手套、护目镜及

防毒面具。皮肤接触后应立即用大量清水冲洗，若吸入粉尘需转移至通风处。废弃物处理应遵守当地危险化学品管理条例。

注：以上信息基于实验室测试数据，实际应用需根据具体工艺条件进行优化。