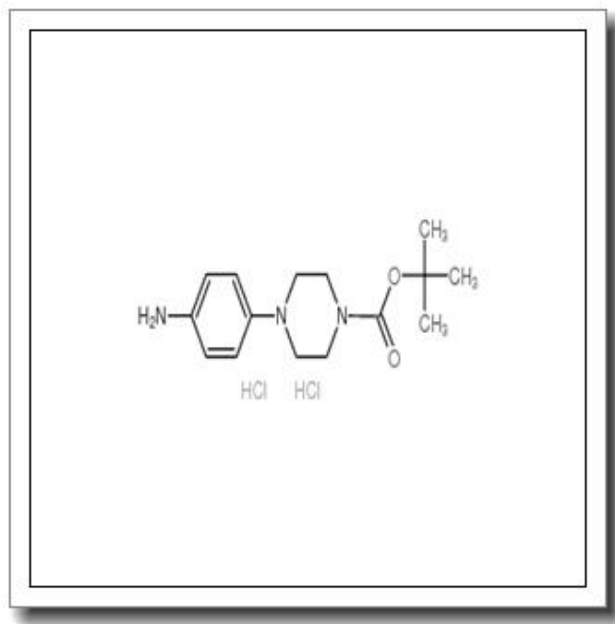


1-BOC-4-(4-氨基苯基)哌嗪二盐酸盐

tert-butyl 4-(4-aminophenyl)piperazine-1-carboxylate, dihydrochloride



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl 4-(4-aminophenyl)piperazine-1-carboxylate, dihydrochloride</i>
中文名称	1-BOC-4-(4-氨基苯基)哌嗪二盐酸盐
CAS 号	193902-64-6
分子式	C ₁₅ H ₂₅ Cl ₂ N ₃ O ₂
分子量	350.284
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 tert-butyl 4-(4-aminophenyl)piperazine-1-carboxylate dihydrochloride，中文名为 1-BOC-4-(4-氨基苯基)哌嗪二盐酸盐，CAS 号 193902-64-6。分子式为 C₁₅H₂₅Cl₂N₃O₂，分子量 350.284，纯度 ≥96%。该化合物属于哌嗪衍生物，具有 BOC 保护基团和芳香氨基结构，易溶于极性有机溶剂（如 DMSO、甲醇），在酸性条件下稳定性良好，需避免强碱环境。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌嗪类化合物的关键中间体，其结构中的氨基和 BOC 保护基赋予其高反应活性，常用于药物分子构建。哌嗪环的刚性骨架和氨基的配位能力使其在靶向蛋白相互作用中表现突出，尤其在神经递质受体调节剂和激酶抑制剂的研发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药研发领域，具体包括：

1. 作为抗抑郁药、抗精神病药（如 5-HT 受体调节剂）的合成前体；
2. 用于构建抗癌药物中的激酶抑制剂核心结构；
3. 在 PET 显影剂开发中作为放射性标记配体的中间体。实验室级产品适用于高通量筛选及结构-活性关系（SAR）研究。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20° C 干燥环境中，避免光照及湿度波动。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时需在通风橱中操作，佩戴防护手套与护目镜。溶解推荐使用无水 DMSO，配制后溶液建议现配现用，避免反复冻融。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 ≥96%，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明其急性毒性（LD₅₀）为口服大鼠 >500 mg/kg，但可能对眼睛和皮肤产生刺激性。操作时需遵守

GHS 分类: H315 (造成皮肤刺激)、H319 (造成严重眼刺激), 应急处理需用大量清水冲洗接触部位并就医。废弃物处置应参照当地法规, 不可直接排入环境。