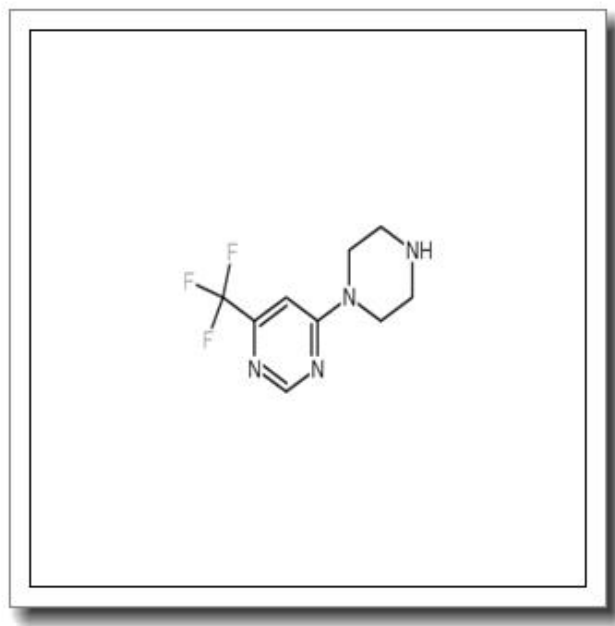


# 4-(1-哌嗪)-6-(三氟甲基)嘧啶

*4-(1-Piperazinyl)-6-(trifluoromethyl)pyrimidine*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	4-(1-Piperazinyl)-6-(trifluoromethyl)pyrimidine
中文名称	4-(1-哌嗪)-6-(三氟甲基)嘧啶
CAS 号	845616-55-9
分子式	C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> F <sub>3</sub> N <sub>4</sub>
分子量	232.206
纯度	≥96%

## 产品说明

### 4-(1-哌嗪)-6-(三氟甲基)嘧啶产品说明书

#### 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-(1-Piperaziny1)-6-(trifluoromethyl)pyrimidine，分子式 C<sub>9</sub>H<sub>11</sub>F<sub>3</sub>N<sub>4</sub>，分子量 232.206，CAS 号 845616-55-9。其结构中的嘧啶环与哌嗪基团通过碳氮键连接，三氟甲基的引入显著增强了化合物的疏水性和电子效应。纯度 ≥96% (HPLC)，熔点为 128-132℃，易溶于二甲基亚砷 (DMSO) 和甲醇，微溶于水 (25℃时溶解度 <0.1 mg/mL)。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为杂环胺类衍生物，具有独特的生物活性。哌嗪基团赋予其碱性特征 (pKa ≈ 7.2)，可作为氢键受体参与分子识别；三氟甲基嘧啶结构则表现出良好的代谢稳定性和膜穿透性。在药物化学中，此类结构常作为激酶抑制剂或 GPCR 调节剂的药效团，尤其在抗肿瘤和中枢神经系统药物研发中具有重要价值。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药中间体及生化研究领域。具体包括：

- 1) 作为 EGFR 或 PI3K 抑制剂类药物的关键合成砌块
- 2) 用于构建放射性标记探针，研究受体-配体相互作用机制
- 3) 在农药化学中用于开发新型杀虫剂前体化合物
- 4) 作为有机催化反应的配体或催化剂组分

#### 4. 储存条件与使用建议

推荐避光保存于 -20℃ 干燥环境中，长期储存需充氮气保护。开封后建议分装使用，避免反复冻融。实验操作应在通风橱中进行，使用丁腈手套和护目镜。溶解时优先选用 DMSO 配制母液 (建议浓度 10 mM)，后续可用缓冲液稀释至工作浓度。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 和质谱三重验证，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据如下：

- 1) GHS 分类: 皮肤刺激 (Category 2)、眼刺激 (Category 2A)
- 2) 避免吸入粉尘, 接触后立即用大量清水冲洗
- 3) 废弃物处置需符合当地危险化学品管理法规
- 4) 运输分类: UN2811 (6.1 类, PG III)

注: 具体实验方案请结合文献方法优化, 本说明数据基于实验室环境测试, 实际应用可能因工艺条件差异需进一步验证。