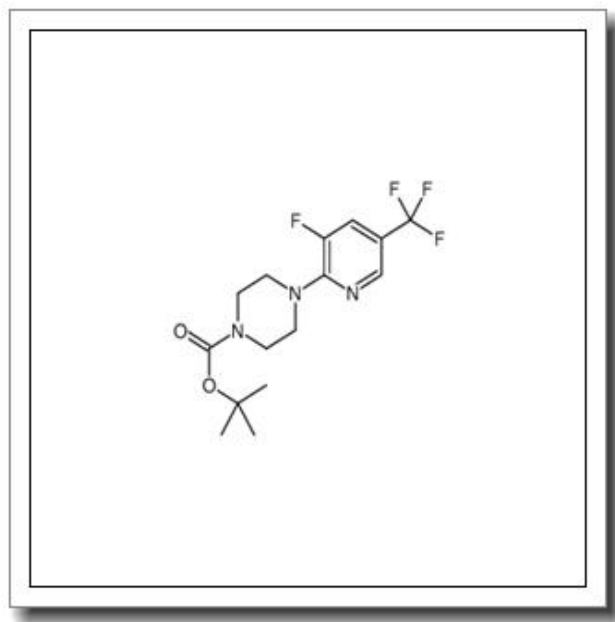


tert-butyl 4-[3-fluoro-5-(trifluoromethyl)pyridin-2-yl]piperazine-1-carboxylate

tert-butyl 4-[3-fluoro-5-(trifluoromethyl)pyridin-2-yl]piperazine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 4-[3-fluoro-5-(trifluoromethyl)pyridin-2-yl]piperazine-1-carboxylate
中文名称	tert-butyl 4-[3-fluoro-5-(trifluoromethyl)pyridin-2-yl]piperazine-1-carboxylate
CAS 号	897376-76-0
分子式	C ₁₅ H ₁₉ F ₄ N ₃ O ₂
分子量	349.324
纯度	≥96%

产品说明

以下是符合要求的专业产品说明:

产品名称: tert-butyl 4-[3-fluoro-5-(trifluoromethyl)pyridin-2-yl]piperazine-1-carboxylate

CAS 号: 897376-76-0

分子式: C₁₅H₁₉F₄N₃O₂

分子量: 349.324

纯度: ≥96%

1. 产品概述与化学特性

本产品是一种含氟吡啶基哌嗪衍生物, 为白色至类白色结晶性粉末。其结构中同时包含叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团、三氟甲基及氟代吡啶环, 赋予分子独特的空间位阻效应和电子特性。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。其熔点和旋光性需通过实测确定, 建议在使用前进行结构验证 (如 NMR 或 HPLC-MS)。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌嗪类化合物的修饰衍生物, 该分子可通过 Boc 基团的脱保护反应暴露活性氨基, 进而作为关键中间体参与多种药物分子的合成。三氟甲基和氟原子的引入显著增强其脂溶性和代谢稳定性, 使其在靶向药物设计中具有特殊价值。其吡啶环结构可模拟生物体内天然配体的结合模式, 常用于激酶抑制剂和 GPCR 调节剂的开发。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域, 具体包括:

- 作为抗肿瘤药物 (如 ALK 抑制剂) 的合成前体
- 用于构建中枢神经系统药物 (如 5-HT 受体调节剂) 的核心骨架
- 在农药化学中作为新型杀虫剂的中间体
- 在 PET 显影剂开发中作为氟标记的模板化合物

4. 储存条件与使用建议

建议在-20℃、惰性气体（如氩气）保护下长期储存，开封后需充氮密封。使用前应在干燥环境下恢复至室温以避免结露。称量时需佩戴防尘口罩和丁腈手套，推荐在通风橱中操作。溶解性测试表明，建议优先使用 DMF 或乙腈作为反应溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，重金属含量 $< 10\text{ppm}$ 。急性毒性数据显示其 LD50（大鼠经口） $> 500\text{mg/kg}$ ，但仍属于刺激性化学品。接触皮肤后应立即用大量清水冲洗，眼部接触需用生理盐水持续冲洗 15 分钟。废弃物处理应遵守当地危险化学品管理条例，不可直接排入下水系统。

（注：实际文档可根据需要补充结构式、谱图数据或具体毒理学参数）