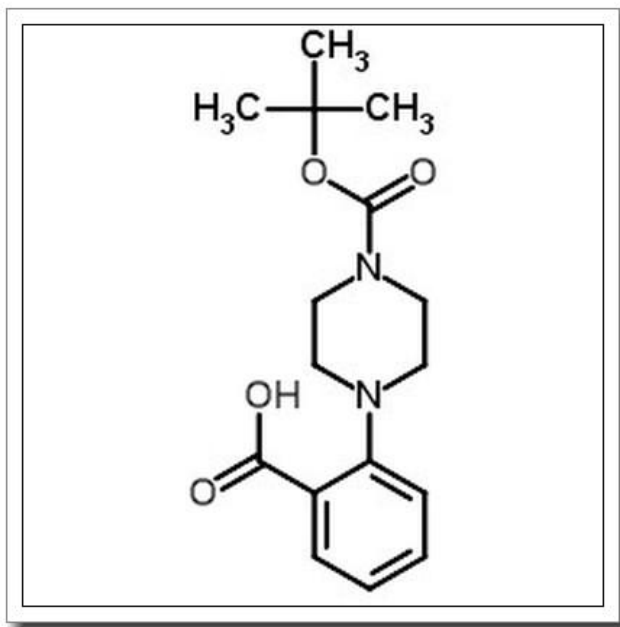


1-BOC-4-(2-羧基苯基)哌嗪

2-(4-(tert-Butoxycarbonyl)piperazin-1-yl)benzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-(4-(tert-Butoxycarbonyl)piperazin-1-yl)benzoic acid
中文名称	1-BOC-4-(2-羧基苯基)哌嗪
CAS 号	444582-90-5
分子式	C ₁₆ H ₂₂ N ₂ O ₄
分子量	306.357
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

2-(4-(叔丁氧羰基)哌嗪-1-基)苯甲酸 (化学名称: 2-(4-(tert-Butoxycarbonyl)piperazin-1-yl)benzoic acid) 是一种哌嗪衍生物, 分子式为 $C_{16}H_{22}N_2O_4$, 分子量为 306.357。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度高于 96%, CAS 号为 444582-90-5。其结构中的叔丁氧羰基 (BOC) 保护基团和羧酸官能团使其在有机合成和药物化学中具有重要价值。该化合物易溶于极性有机溶剂 (如 DMSO、DMF), 微溶于水, 需在干燥条件下保存以避免水解。

2. 生物化学功能与重要性

1-BOC-4-(2-羧基苯基)哌嗪是合成多种生物活性分子的关键中间体, 尤其在药物研发领域广泛应用。其哌嗪环结构赋予其良好的配位能力和分子多样性, 常用于构建激酶抑制剂、G 蛋白偶联受体 (GPCR) 调节剂等药物分子。BOC 保护基团可在酸性条件下脱除, 便于后续官能团修饰, 而苯甲酸基团则可通过酯化或酰胺化反应进一步衍生化。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于医药中间体合成, 具体包括以下领域:

1. 抗肿瘤药物研发: 作为激酶抑制剂的哌嗪骨架前体。
2. 中枢神经系统药物: 用于合成 5-HT 受体调节剂或抗抑郁药物。
3. 抗菌剂开发: 通过修饰羧基制备具有抗菌活性的衍生物。
4. 材料科学: 作为配体用于金属有机框架 (MOF) 材料的制备。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 下密封保存, 避免光照和潮湿环境。开封后需充入惰性气体 (如氮气) 以延长稳定性。使用前需恢复至室温并短暂离心以避免结块。溶解时推荐使用无水 DMSO, 浓度不宜超过 50 mM。操作时需佩戴防护手套、护目镜, 并在通风橱中进行。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，残留溶剂符合 ICH 标准。MS 和 NMR 数据可供验证结构。安全信息：

1. 避免吸入粉尘或接触皮肤，可能引起轻微刺激。
2. 如不慎接触眼睛，立即用大量清水冲洗并就医。
3. 废弃物需按危险化学品规范处置。
4. 安全数据表（SDS）可随货提供，请查阅详细毒理学数据。

注：本产品仅限科研用途，不可用于人体或食品相关领域。