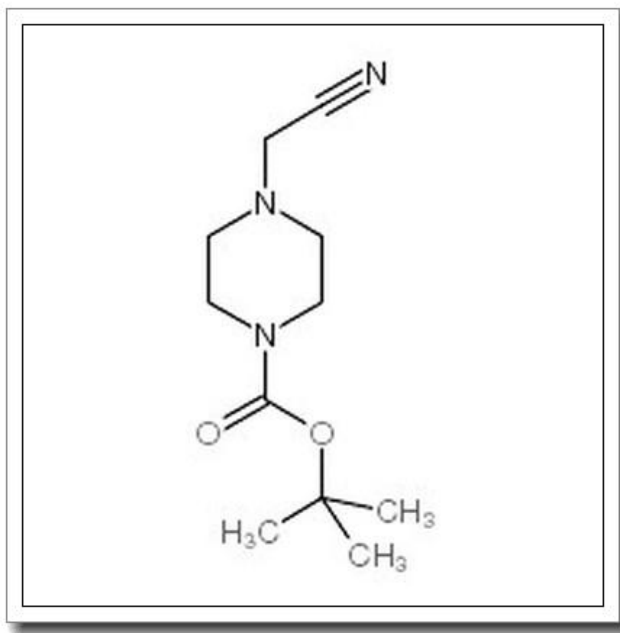


1-BOC-4-氰甲基哌嗪

tert-butyl 4-(cyanomethyl)piperazine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl 4-(cyanomethyl)piperazine-1-carboxylate</i>
中文名称	1-BOC-4-氰甲基哌嗪
CAS 号	77290-31-4
分子式	C ₁₁ H ₁₉ N ₃ O ₂
分子量	225.287
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-BOC-4-氰甲基哌嗪（化学名称：tert-butyl 4-(cyanomethyl)piperazine-1-carboxylate）是一种重要的哌嗪类衍生物，CAS 号为 77290-31-4，分子式为 C₁₁H₁₉N₃O₂，分子量为 225.287。该化合物为白色至类白色结晶或粉末，纯度通常高于 96%。其结构中的 BOC（叔丁氧羰基）保护基和氰甲基官能团赋予其独特的化学性质，使其在有机合成和药物化学中具有广泛的应用价值。该化合物易溶于常见有机溶剂如二氯甲烷、甲醇和乙腈，但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

1-BOC-4-氰甲基哌嗪是一种多功能中间体，其氰甲基官能团可作为活性位点参与多种亲核取代反应，而 BOC 保护基则可在酸性条件下选择性脱除。这种特性使其成为合成复杂分子（如药物活性成分和功能材料）的关键砌块。在药物研发中，哌嗪环结构常见于抗抑郁、抗精神病和抗菌药物中，而氰甲基的引入进一步扩展了其结构修饰的可能性。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于医药、农药和材料科学领域。在医药化学中，它是合成哌嗪类药物的关键中间体，例如用于制备抗肿瘤和中枢神经系统药物的先导化合物。在农药领域，氰甲基哌嗪衍生物可作为杀虫剂或杀菌剂的活性组分。此外，该化合物还可用于功能高分子材料的合成，如作为交联剂或改性剂。

4. 储存条件与使用建议

建议将 1-BOC-4-氰甲基哌嗪密封保存于干燥、阴凉的环境中，避免光照和潮湿。储存温度应控制在 2-8° C，以延长其稳定性。使用时需在惰性气体（如氮气）保护下操作，防止氧化或降解。实验人员应佩戴防护手套、护目镜和实验服，并在通风良好的环境下处理该化学品。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测，确保纯度高于 96%。其安全数据表（SDS）显

示, 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激, 操作时应避免直接接触。如不慎接触, 应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按照当地化学品处理法规进行处置, 不可随意丢弃。

以上信息基于现有实验数据和文献报道, 具体应用需根据实际需求进一步验证。