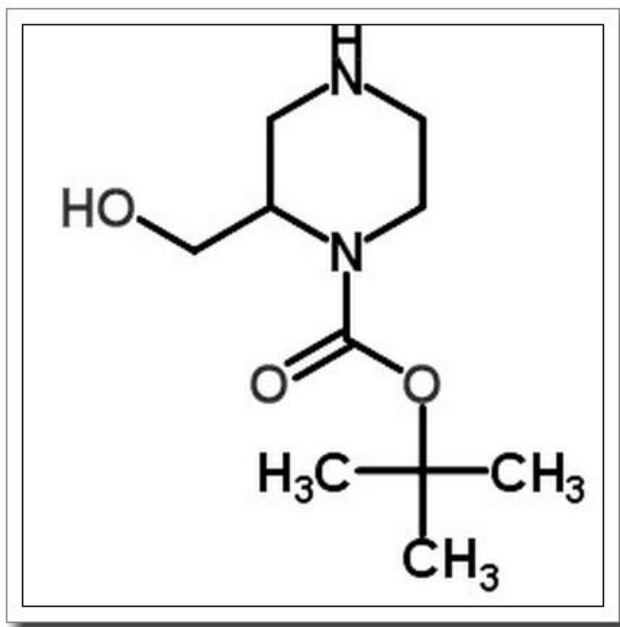


1-N-叔丁氧羰基-2-(羟甲基)哌嗪

tert-butyl 2-(hydroxymethyl)piperazine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 2-(hydroxymethyl)piperazine-1-carboxylate
中文名称	1-N-叔丁氧羰基-2-(羟甲基)哌嗪
CAS 号	205434-75-9
分子式	C ₁₀ H ₂₀ N ₂ O ₃
分子量	216.277
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粉末，化学名称为 1-N-叔丁氧羰基-2-(羟甲基)哌嗪 (tert-butyl 2-(hydroxymethyl)piperazine-1-carboxylate)，CAS 号 205434-75-9，分子式 C₁₀H₂₀N₂O₃，分子量 216.277。其结构包含哌嗪环、叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团及羟甲基活性位点，纯度 ≥96% (HPLC)。该化合物在常温下稳定，易溶于有机溶剂如二氯甲烷、甲醇，微溶于水，熔点为 98-102°C。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌嗪类衍生物，本品兼具保护基团与活性官能团，是医药中间体合成中的关键砌块。Boc 基团可选择性脱保护，羟甲基则便于进一步衍生化（如酯化、醚化），广泛应用于多肽合成、小分子抑制剂及催化剂配体的构建。其结构特性在调节药物分子的溶解性、靶向性和代谢稳定性中具有重要作用。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于以下领域：

- (1) 药物研发：作为抗肿瘤、抗病毒药物（如 HIV 蛋白酶抑制剂）的中间体；
- (2) 多肽化学：用于固相合成中哌嗪结构的引入；
- (3) 材料科学：合成功能性高分子材料的单体；
- (4) 不对称催化：作为手性配体的前体。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 2-8°C 干燥环境中，避免光照与湿气。开封后需充惰性气体（如氮气）保护，以防降解。使用时需在通风橱中操作，佩戴防护手套与护目镜。溶解建议采用无水 DMF 或 THF，若需水相反应，可先溶于少量有机溶剂再缓慢稀释。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC、NMR 及质谱严格质检，符合药物研发标准。安全数据：LD₅₀（大鼠，口服）>2000 mg/kg，属于低毒类，但可能对眼睛和皮肤有轻微刺激性。若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。