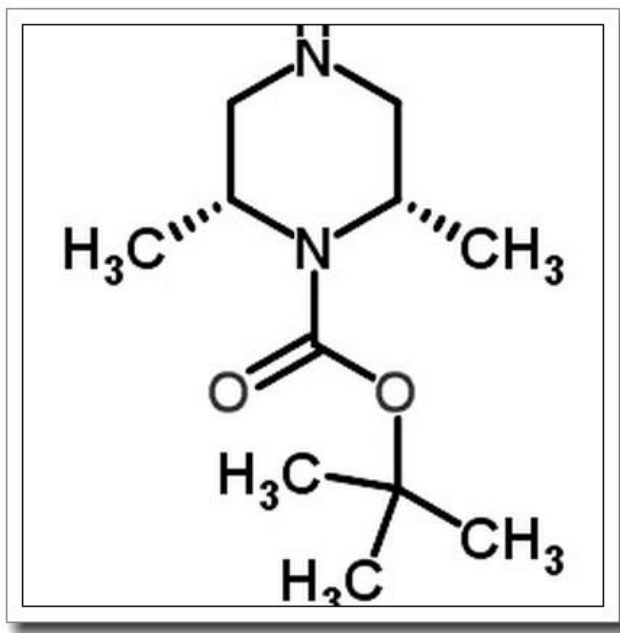


(2R,6s)-2,6-二甲基哌嗪-1-羧酸叔丁酯

tert-butyl (2S, 6R)-2, 6-dimethylpiperazine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl (2S, 6R)-2, 6-dimethylpiperazine-1-carboxylate</i>
中文名称	(2R, 6s)-2, 6-二甲基哌嗪-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	180975-66-0
分子式	C ₁₁ H ₂₂ N ₂ O ₂
分子量	214. 305
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(2R, 6S)-2, 6-二甲基哌嗪-1-羧酸叔丁酯 (CAS 号: 180975-66-0) 是一种高纯度有机化合物, 分子式为 $C_{11}H_{22}N_2O_2$, 分子量为 214.305。该化合物属于哌嗪类衍生物, 具有特定的立体构型 (2R, 6S), 其叔丁氧羰基 (Boc) 保护基赋予其良好的化学稳定性。常温下为白色至类白色结晶或粉末, 纯度通常大于 96%, 适合用于精细有机合成和药物研发。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌嗪类化合物的关键中间体, 该产品在生物活性分子构建中具有重要作用。其 Boc 保护基可在酸性条件下选择性脱除, 而哌嗪骨架的刚性结构有助于调节分子的空间构象和药理活性。在药物化学中, 此类结构常用于抗生素、抗病毒剂及中枢神经系统药物的合成, 例如作为 HIV 蛋白酶抑制剂或抗菌药物的核心片段。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药研发和有机合成领域。具体用途包括: 作为手性砌块用于不对称合成; 在肽类化合物修饰中引入哌嗪结构; 作为催化剂或配体参与过渡金属催化反应。此外, 其在抗肿瘤药物先导化合物优化中也具有潜在价值, 可通过进一步官能团化衍生出多样化的生物活性分子。

4. 储存条件与使用建议

建议在 2-8°C 干燥避光条件下储存, 长期保存需置于惰性气体 (如氮气) 环境中。使用前需恢复至室温并避免接触湿气, 以防 Boc 基团水解。实验操作应在通风橱中进行, 并佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 微溶于水。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行严格质量控制, 确保异构体纯度及化学结构准确性。安全数据表明, 其急性毒性较低 (LD50 未明确), 但仍需避免吸入或皮肤直

接接触。废弃物处置应遵循有机溶剂处理规范，不可直接排入下水道。如发生意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。

（注：以上说明基于实验室环境下的标准操作，实际应用需结合具体实验方案调整。）