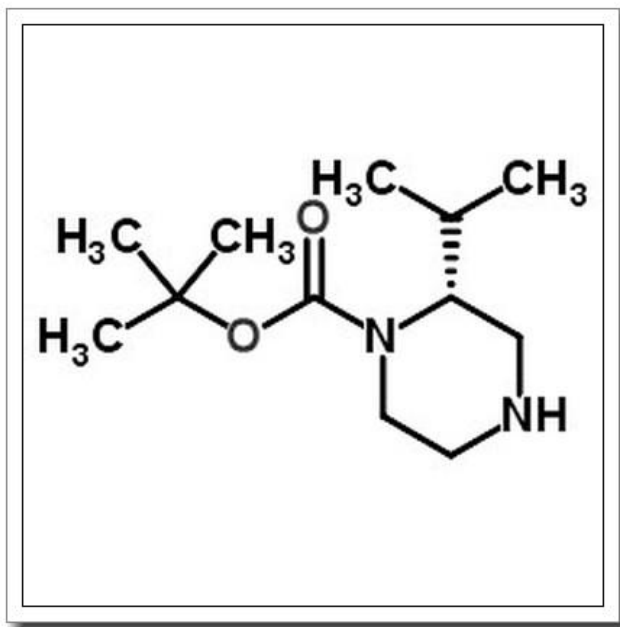


(R)-1-叔丁氧羰基-2-异丙基哌嗪

(R)-1-Boc-2-Isopropylpiperazine



产品基本信息

属性	值
化学名称	(R)-1-Boc-2-Isopropylpiperazine
中文名称	(R)-1-叔丁氧羰基-2-异丙基哌嗪
CAS 号	674792-04-2
分子式	C ₁₂ H ₂₄ N ₂ O ₂
分子量	228.331
纯度	>96%

产品说明

(R)-1-Boc-2-异丙基哌嗪产品说明书

1. 产品概述与化学特性

(R)-1-Boc-2-异丙基哌嗪 (CAS 号: 674792-04-2) 是一种高纯度手性哌嗪衍生物, 化学式为 $C_{12}H_{24}N_2O_2$, 分子量 228.331。该化合物以 (R)-构型为特征, 叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团赋予其优异的稳定性与反应选择性。常温下为白色至类白色结晶粉末, 易溶于有机溶剂如二氯甲烷、乙酸乙酯, 微溶于水。其纯度经 HPLC 验证 $\geq 96\%$, 符合医药中间体合成标准。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌嗪类骨架的核心结构, 该化合物在立体选择性合成中具有关键作用。Boc 保护基可温和脱除, 确保氨基在后续反应中的活性; 异丙基侧链的空间位阻效应能显著影响分子手性中心的构建效率。其 (R)-构型对生物活性分子的立体专一性 (如蛋白酶抑制剂、GPCR 配体) 至关重要, 是优化药物代谢动力学特性的重要结构单元。

3. 主要应用领域与具体用途

3.1 医药中间体: 用于合成抗病毒药物 (如 HCV NS5A 抑制剂)、精神类疾病治疗剂的手性砌块。

3.2 不对称催化: 作为配体前体参与过渡金属催化反应, 构建 α -手性中心。

3.3 多肽修饰: 通过哌嗪环氮原子引入特异性官能团, 增强肽类化合物的膜穿透性。

4. 储存条件与使用建议

4.1 储存: 密封保存于 -20°C 惰性气体 (如氩气) 环境中, 避免光照与湿度。

4.2 复溶: 建议使用无水 DMF 或 THF 溶解, 现配现用以防止 Boc 基团水解。

4.3 操作: 在通风橱中佩戴防化手套与护目镜, 避免吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

5.1 质检标准: 通过 $^1\text{H NMR}$ (δ 1.44 ppm 特征 Boc 峰)、质谱 ($[\text{M}+\text{H}]^+$ m/z)

229) 及手性 HPLC (ee 值 $\geq 99\%$) 三重验证。

5.2 安全数据: GHS 分类为刺激性 (Category 2), UN 编号非管制。若接触皮肤, 立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。

5.3 废弃物处理: 按危险有机废物处置, 禁止直接排入下水道。

本产品专为研发级应用设计, 不适用于临床或食品用途。具体合成方案需根据实际反应体系优化。