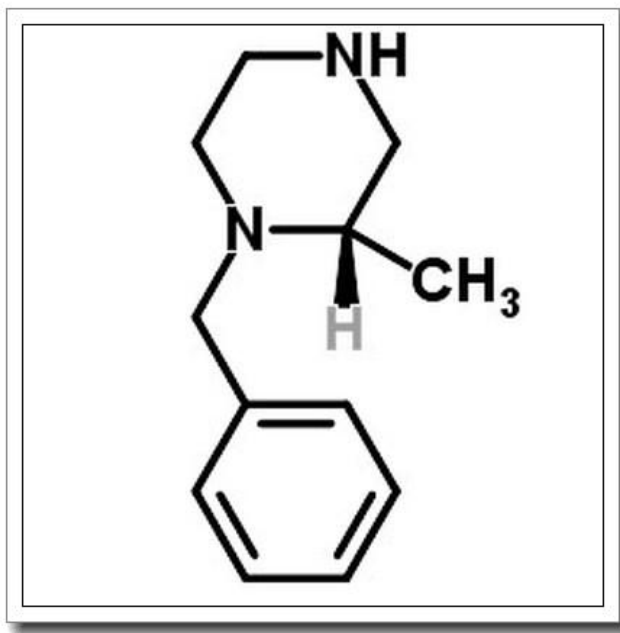


# (S)-1-苄基-2-甲基哌嗪

*(S)-1-Benzyl-2-methylpiperazine*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	(S)-1-Benzyl-2-methylpiperazine
中文名称	(S)-1-苄基-2-甲基哌嗪
CAS 号	511254-92-5
分子式	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub>
分子量	190.285
纯度	>96%

## 产品说明

### (S)-1-苄基-2-甲基哌嗪产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

(S)-1-苄基-2-甲基哌嗪 (CAS 号: 511254-92-5) 是一种手性哌嗪衍生物, 分子式为  $C_{12}H_{18}N_2$ , 分子量 190.285。该化合物以单一对映体形式存在, 纯度超过 96%, 具有明确的立体构型。其结构中的苄基和甲基取代基赋予其独特的空间位阻和电子效应, 使其在不对称合成和药物化学中表现出显著的应用价值。常温下为白色至类白色结晶粉末, 易溶于有机溶剂如甲醇、乙醇和二氯甲烷, 微溶于水。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为哌嗪类化合物的手性砌块, (S)-1-苄基-2-甲基哌嗪在生物活性分子构建中起关键作用。其哌嗪环可作为氢键供体/受体, 增强与生物靶点的相互作用, 而手性中心则能显著影响药物分子的立体选择性和药理活性。该化合物常用于调节中枢神经系统 (CNS) 药物活性, 尤其在多巴胺受体和 5-羟色胺受体配体的设计中具有重要地位。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本产品主要用于以下方向: 一是作为手性助剂参与不对称催化反应, 如构建  $\alpha$ -氨基酸衍生物; 二是作为核心骨架用于抗抑郁药、抗精神病药及镇痛药的中间体合成; 三是在金属有机框架 (MOF) 材料中作为配体, 调控材料孔隙率。具体案例包括用于帕金森病治疗药物的结构优化, 以及作为激酶抑制剂的构效关系研究模板。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在惰性气体保护下密封储存, 温度控制在 2-8°C 避光保存, 长期储存需置于干燥器中。开封后建议一次性使用完毕, 若需分次使用, 需在手套箱中操作以避免吸湿。溶解时优先选用氮气脱气的有机溶剂, 反应体系中建议添加分子筛以除水。实验操作应在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

## 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ ，手性纯度  $\geq 99\%$  (Chiral HPLC)，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据表明，其急性毒性 (LD50 大鼠口服) 为 1200 mg/kg，属于刺激性物质 (GHS 分类: Eye Irrit. 2)。操作时需佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套，若接触眼睛需立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物处理应遵循当地危险化学品法规，不可直接排入下水道。

(注: 本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件进一步验证。)