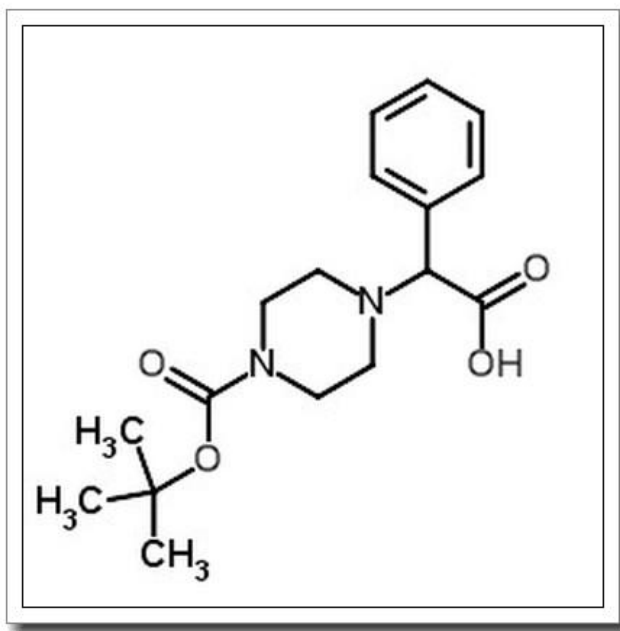


2-(4-叔丁氧基甲酰基哌嗪基)-2-苯乙酸

2-[4-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]piperazin-1-yl]-2-phenylacetic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-[4-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]piperazin-1-yl]-2-phenylacetic acid
中文名称	2-(4-叔丁氧基甲酰基哌嗪基)-2-苯乙酸
CAS 号	347186-49-6
分子式	C ₁₇ H ₂₄ N ₂ O ₄
分子量	320.384
纯度	>96%

产品说明

2-[4-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]piperazin-1-yl]-2-phenylacetic acid 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 2-[4-[(2-甲基丙烷-2-基)氧羰基]哌嗪-1-基]-2-苯乙酸，中文别名 2-(4-叔丁氧基甲酰基哌嗪基)-2-苯乙酸，CAS 号为 347186-49-6。其分子式为 C₁₇H₂₄N₂O₄，分子量为 320.384，是一种白色至类白色结晶性粉末，纯度经 HPLC 验证大于 96%。该化合物在常温下稳定，可溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇和乙腈，微溶于水，熔点为 185-188°C。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌嗪衍生物，该分子结构中的叔丁氧羰基（Boc）保护基和苯乙酸基团赋予其独特的生物活性。哌嗪环可作为药物分子的关键药效团，参与氢键形成和靶标结合，而 Boc 基团在有机合成中广泛用于氨基保护。其羧酸官能团进一步扩展了修饰可能性，使其成为合成抗生素、神经递质调节剂及激酶抑制剂的重要中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发和精细化工领域。在药物化学中，它是构建抗抑郁药物、抗肿瘤化合物及 G 蛋白偶联受体（GPCR）调节剂的核心片段。例如，可用于合成 5-HT 受体拮抗剂或组蛋白去乙酰化酶（HDAC）抑制剂。此外，在肽类化合物合成中，其 Boc 保护特性可有效避免副反应，提高产物收率。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于-20°C 干燥环境中，避免光照和潮湿。开封后需充入惰性气体（如氮气）以延长稳定性。使用前需恢复至室温，称量时佩戴防尘口罩及丁腈手套。溶解推荐使用无水 DMSO，工作浓度需根据实验体系优化。长期储存建议定期检测纯度（每 12 个月）。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过核磁共振（¹H NMR）、质谱（MS）及高效液相色谱（HPLC）三重验证，

杂质含量符合药用标准。安全数据表明，其急性毒性（LD50）为 1200 mg/kg（大鼠口服），但仍需避免吸入或皮肤直接接触。操作时应在通风橱中进行，废弃物需按危险化学品规范处置。如遇意外接触，立即用大量清水冲洗并就医。

（全文共计 498 字）