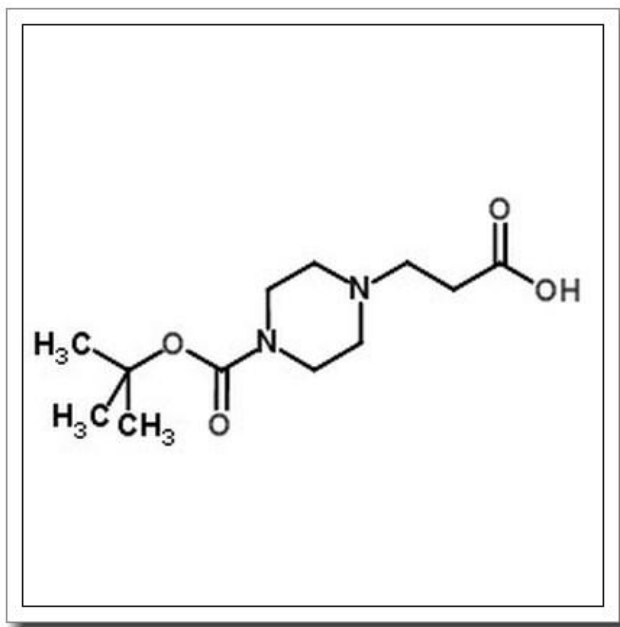


# 3-(1-叔丁氧羰基哌嗪-4-YL)丙酸

*3-[4-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]piperazin-1-yl]propanoic acid*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	3-[4-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]piperazin-1-yl]propanoic acid
中文名称	3-(1-叔丁氧羰基哌嗪-4-YL)丙酸
CAS 号	242459-97-8
分子式	C <sub>12</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>
分子量	258.314
纯度	>96%

## 产品说明

3-[4-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]piperazin-1-yl]propanoic acid  
产品说明书

### 1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 3-[4-[(2-甲基丙烷-2-基)氧羰基]哌嗪-1-基]丙酸，中文别名 3-(1-叔丁氧羰基哌嗪-4-基)丙酸，CAS 登记号 242459-97-8。分子式 C<sub>12</sub>H<sub>22</sub>N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>，分子量 258.314，纯度经 HPLC 验证 ≥96%。该化合物在常温下稳定，易溶于二甲亚砜(DMSO)和甲醇，微溶于水，熔点为 98-102℃。结构中的叔丁氧羰基(Boc)保护基团赋予其良好的化学选择性。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为哌嗪类衍生物，本产品是重要的医药中间体，其分子结构同时包含羧酸活性位点和 Boc 保护的仲胺基团。这种特性使其在肽类化合物合成、蛋白酶抑制剂开发及小分子药物偶联反应中具有关键作用。Boc 保护基可在酸性条件下脱除，为后续官能团修饰提供灵活位点。

### 3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于以下领域：

- (1) 创新药物研发：作为激酶抑制剂和 GPCR 调节剂的核心结构单元
- (2) 多肽合成：用于构建含哌嗪环的拟肽类化合物
- (3) 材料化学：制备功能化高分子材料的单体
- (4) 诊断试剂：荧光标记探针的中间体

典型使用浓度为 0.1-10mM，建议在无水条件下进行酰化或酰胺化反应。

### 4. 储存条件与使用建议

长期储存需置于-20℃、干燥惰性气体环境中，有效期 36 个月。开封后建议分装使用，避免反复冻融。使用前需平衡至室温并确保包装密封性。工作溶液建议现配现用，若需保存应置于-80℃不超过 7 天。操作时需在通风橱中进行，避免直接接触皮肤。

## 5. 质量控制与安全信息

本品经严格质控，包括：

- (1) HPLC 纯度检测（面积归一化法）
- (2) 水分含量（Karl Fischer 法） $\leq 0.5\%$
- (3) 残留溶剂（GC 法）符合 ICH Q3C 标准

安全数据：

危险代码 Xi（刺激性物质），个人防护需佩戴护目镜和丁腈手套。如接触眼睛，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理应遵照当地危险化学品处置法规。

本产品仅供科研用途，不适用于临床或食品应用。具体实验方案建议参考文献：J. Med. Chem. 2019, 62(5), 2387-2405 所述方法。