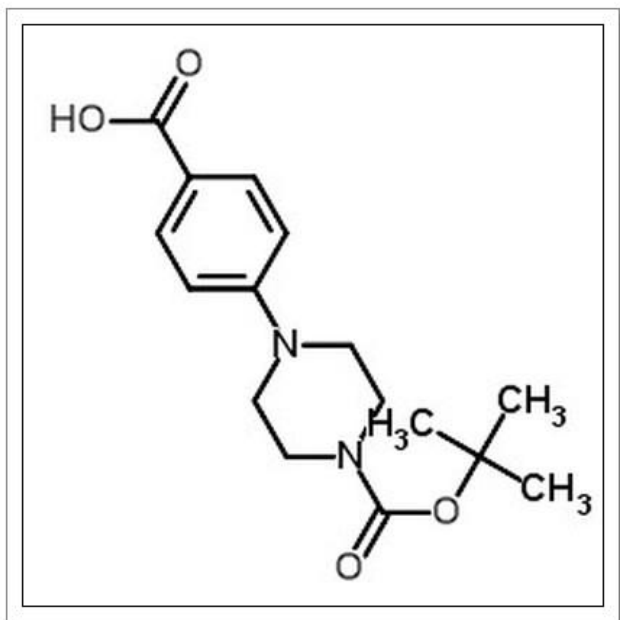


4-(4-羧基苯基)哌嗪-1-羧酸叔丁酯

4-(4-carboxy-phenyl)-piperazine-1-carboxylic acid tert-butyl ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-(4-carboxy-phenyl)-piperazine-1-carboxylic acid tert-butyl ester
中文名称	4-(4-羧基苯基)哌嗪-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	162046-66-4
分子式	C ₁₆ H ₂₂ N ₂ O ₄
分子量	306.357
纯度	>96%

产品说明

4-(4-羧基苯基)哌嗪-1-羧酸叔丁酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 4-(4-carboxy-phenyl)-piperazine-1-carboxylic acid tert-butyl ester，是一种含哌嗪环和羧酸官能团的有机化合物。其分子式为 C₁₆H₂₂N₂O₄，分子量 306.357，CAS 号为 162046-66-4。该化合物为白色至类白色结晶性粉末，纯度>96%，可溶于常见有机溶剂如 DMSO 和甲醇，微溶于水。结构中的叔丁酯基团和羧基使其成为重要的中间体，适用于进一步衍生化反应。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物兼具哌嗪环的碱性特征与羧酸的酸性特性，可作为多功能砌块用于药物化学和生物偶联领域。哌嗪环作为常见药效团，能增强分子与生物靶点的相互作用；而羧基可通过酯化、酰胺化等反应实现结构修饰。其叔丁酯保护基在酸性条件下可选择性脱除，为定向合成提供便利。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发和材料科学领域：

- 作为抗抑郁、抗精神病药物合成的关键中间体
- 用于构建靶向递送系统的 linker 分子
- 在金属有机框架（MOF）材料制备中作为有机配体
- 通过羧基活化参与蛋白质偶联反应

4. 储存条件与使用建议

建议在-20℃干燥避光条件下长期储存，短期使用可存放于 2-8℃环境。开封后需充入惰性气体保护，避免反复冻融。使用时需在干燥惰性气氛下操作，建议现配现用。水溶液体系需调节 pH 至中性以防止酯基水解。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度>96%，残留溶剂符合 ICH 标准。该产品对眼睛和呼吸道有轻微刺激性，操作时应佩戴防护手套和护目镜。若不慎接触皮肤，需立即用大量清水冲

洗。废弃物应作为有害化学品处置，避免直接排入环境。安全数据表（SDS）可随货提供。

本产品仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。具体应用前请查阅最新文献并开展小试实验验证适用性。