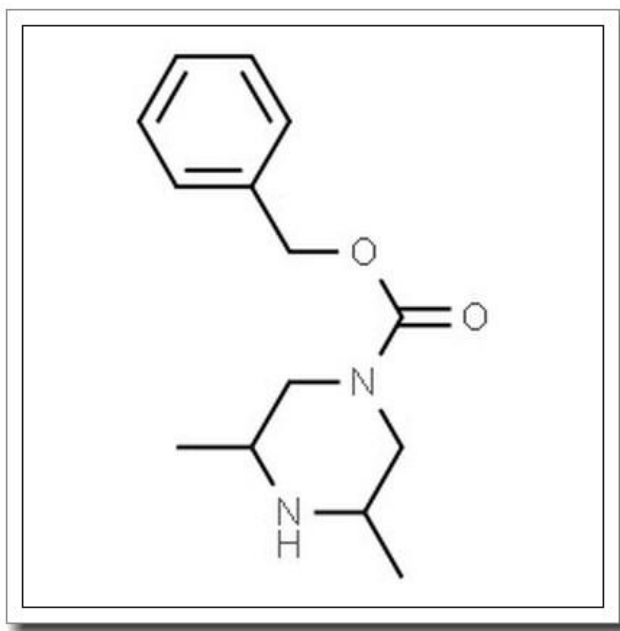


REL-苄基(3R,5S)-3,5-二甲基哌嗪-1-甲酸

1-CBZ-3R, 5S-dimethylpiperazine



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-CBZ-3R, 5S-dimethylpiperazine
中文名称	REL-苄基(3R, 5S)-3, 5-二甲基哌嗪-1-甲酸
CAS 号	623585-97-7
分子式	C ₁₄ H ₂₀ N ₂ O ₂
分子量	248. 32
纯度	>96%

产品说明

1-苄基(3R, 5S)-3, 5-二甲基哌嗪-1-甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 1-CBZ-3R, 5S-dimethylpiperazine, 中文命名为 REL-苄基(3R, 5S)-3, 5-二甲基哌嗪-1-甲酸, CAS 号为 623585-97-7。其分子式为 $C_{14}H_{20}N_2O_2$, 分子量为 248.32, 纯度经高效液相色谱 (HPLC) 验证大于 96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 具有特定的立体构型 (3R, 5S), 在有机溶剂如甲醇、乙醇及二氯甲烷中溶解性良好, 但在水中溶解度较低。其结构中的苄氧羰基 (CBZ) 保护基团使其在肽类合成及药物中间体制备中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌嗪类衍生物, 该化合物通过其刚性立体结构可特异性参与手性药物合成, 尤其作为 β -内酰胺类抗生素、抗病毒药物及蛋白酶抑制剂的中间体。其哌嗪环上的氮原子可提供配位或氢键结合位点, 而 CBZ 保护基团在酸性条件下可选择性脱除, 使其成为多步合成反应中的关键模块化构建单元。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于医药研发与精细化工领域, 具体包括:

- (1) 手性药物合成: 作为抗感染药物 (如碳青霉烯类抗生素) 的立体定向中间体;
- (2) PROTAC 分子开发: 通过哌嗪环连接靶蛋白配体与 E3 连接酶配体;
- (3) 不对称催化: 作为手性助剂参与过渡金属催化反应;
- (4) 学术研究: 用于研究酶抑制机制或分子识别过程的模型化合物。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 、避光、干燥条件下密封保存, 长期储存需充入惰性气体 (如氮气)。使用时需在干燥环境中操作, 避免与强酸、强氧化剂接触。溶解推荐使用无水级有机溶剂, 溶液现配现用。若需脱除 CBZ 保护基, 可采用氢化 (Pd/C) 或酸性条件 (如 TFA/DCM)。

5. 质量控制与安全信息

本产品经核磁共振 (1H NMR)、质谱 (MS) 及 HPLC 三重验证, 符合药物研发级标准。安全数据表明其 LD50 (大鼠口服) >2000 mg/kg, 但仍需遵守以下防护措施:

- (1) 操作时佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套;
- (2) 避免吸入粉尘或接触皮肤, 若意外接触需用大量清水冲洗;
- (3) 废弃物应作为有害化学品处置, 符合当地环保法规。

本说明基于现有实验数据编制, 具体应用需结合用户工艺验证。更多技术参数可联系我司技术支持部门获取。