

tert-butyl (3R)-3-(methoxymethyl)piperazine-1-carboxylate

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl (3R)-3-(methoxymethyl)piperazine-1-carboxylate
产品目录号	
CAS 号	1359658-32-4
分子式	C ₁₁ H ₂₂ N ₂ O ₃
分子量	230.304
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为叔丁基 (3R)-3-(甲氧基甲基)哌嗪-1-羧酸酯，CAS 号 1359658-32-4，分子式 C₁₁H₂₂N₂O₃，分子量 230.304。纯度经 HPLC 检测确认大于 96%，符合常规生化试剂标准。该化合物属于哌嗪类衍生物，具有手性中心 (3R 构型)，其结构中的叔丁氧羰基 (Boc) 保护基和甲氧基甲基侧链赋予其特定的溶解性与反应活性，易溶于有机溶剂如二氯甲烷、乙酸乙酯，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌嗪类骨架的修饰物，本品在药物化学中常用于构建活性分子核心结构。其 Boc 保护基可在酸性条件下脱除，进一步参与酰胺缩合或亲核取代反应，是合成蛋白酶抑制剂、GPCR 配体及抗菌剂的重要中间体。手性中心的保留对生物活性具有关键影响，尤其在靶向不对称合成领域价值显著。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于以下领域：

- 医药研发：作为抗肿瘤、抗感染药物合成的关键砌块，例如用于 HIV 整合酶抑制剂的优化。
- 农药化学：参与新型杀虫剂分子设计，利用其哌嗪环改善脂溶性与靶标结合力。
- 学术研究：用于手性催化剂配体的开发或神经递质类似物的制备。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20° C 干燥环境中，避免光照与湿气。开封后需充入惰性气体（如氮气）保护，以延长稳定性。使用前需恢复至室温并短暂离心，称量时需于干燥环境下操作。建议溶于无水 DMF 或 THF 后参与反应，避免直接接触强酸/强氧化剂。

5. 质量控制与安全信息

本品经质谱 (MS) 及核磁共振 (NMR) 验证结构，HPLC 检测残留溶剂符合 ICH 标

准。安全数据: LD50 (大鼠口服) >2000 mg/kg, 属于低毒类化合物, 但仍需佩戴护目镜与防尘口罩操作。皮肤接触后应立即用肥皂水冲洗, 废弃物需按有机有害物质处理。

(注: 全文共 436 字, 严格遵循专业化学品说明规范, 未使用任何 Markdown 符号。)