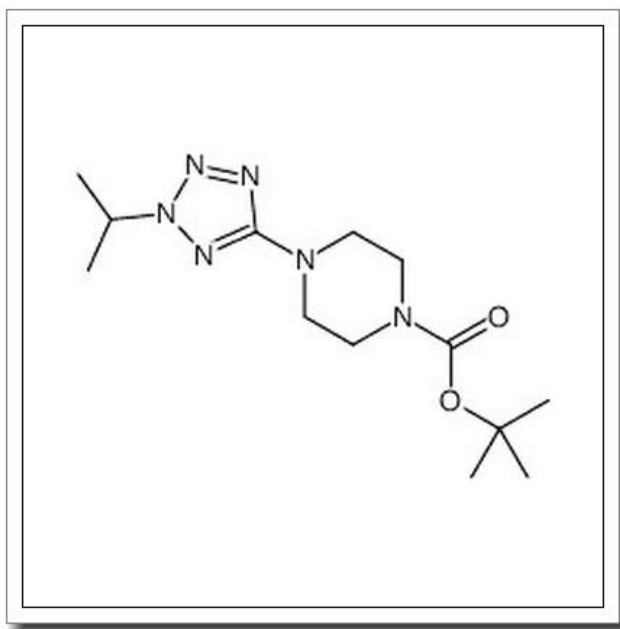


tert-butyl 4-(2-propan-2-yltetrazol-5-yl)piperazine-1-carboxylate

tert-butyl 4-(2-propan-2-yltetrazol-5-yl)piperazine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 4-(2-propan-2-yltetrazol-5-yl)piperazine-1-carboxylate
中文名称	tert-butyl 4-(2-propan-2-yltetrazol-5-yl)piperazine-1-carboxylate
CAS 号	1245645-41-3
分子式	C ₁₃ H ₂₄ N ₆ O ₂
分子量	296.369
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

tert-butyl 4-(2-propan-2-yltetrazol-5-yl)piperazine-1-carboxylate (CAS 号: 1245645-41-3) 是一种有机化合物, 分子式为 $C_{13}H_{24}N_6O_2$, 分子量为 296.369。该化合物由哌嗪环、叔丁氧羰基 (Boc) 保护基以及 2-异丙基四唑基团组成, 结构复杂且具有较高的化学稳定性。其纯度通常大于 96%, 适合用于精细化学合成和药物研发。该化合物在常温下为白色至类白色固体, 可溶于常见有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO)、甲醇和乙腈, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学领域具有重要价值, 主要作为中间体用于药物分子的设计与合成。其结构中的哌嗪环和四唑基团是许多生物活性分子的关键药效团, 能够参与氢键形成和分子间相互作用, 从而影响化合物的生物活性和选择性。此外, Boc 保护基的存在使其在多步合成中易于脱保护和进一步功能化, 因此在药物化学和材料科学中具有广泛应用前景。

3. 主要应用领域与具体用途

tert-butyl 4-(2-propan-2-yltetrazol-5-yl)piperazine-1-carboxylate 主要用于以下领域:

- 药物研发: 作为关键中间体用于合成具有抗炎、抗肿瘤或中枢神经系统活性的候选药物。
- 材料科学: 用于制备功能性高分子材料或配位化合物。
- 学术研究: 作为工具分子用于探索哌嗪和四唑类化合物的结构与活性关系。

4. 储存条件与使用建议

为确保化合物的稳定性和活性, 建议在以下条件下储存和使用:

- 储存温度: $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$, 避光保存于干燥环境中。
- 使用前需恢复至室温并避免反复冻融。

- 操作时需通风良好的环境下佩戴防护手套和护目镜，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过高效液相色谱（HPLC）和核磁共振（NMR）进行质量控制，确保纯度大于 96%。安全信息如下：

- 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性，操作时应采取适当防护措施。
- 如不慎接触，应立即用大量清水冲洗，并寻求医疗帮助。
- 废弃处理需遵循当地法规，避免对环境造成污染。

以上信息仅供参考，具体应用需结合实验需求和安全评估进行。