

tert-butyl 4-[(5R)-5-methyl-7-oxo-5,6-dihydrocyclopenta[d]pyrimidin-4-yl]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 4-[(5R)-5-methyl-7-oxo-5,6-dihydrocyclopenta[d]pyrimidin-4-yl]piperazine-1-carboxylate
产品目录号	
CAS 号	1001180-21-7
分子式	C17H24N4O3
分子量	332.397
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 tert-butyl 4-[(5R)-5-methyl-7-oxo-5,6-dihydrocyclopenta[d]pyrimidin-4-yl]piperazine-1-carboxylate，CAS 号为 1001180-21-7，分子式为 C₁₇H₂₄N₄O₃，分子量为 332.397。其纯度经高效液相色谱（HPLC）测定大于 96%，具有明确的立体构型（5R）和稳定的化学结构。该化合物属于环戊并嘧啶类衍生物，结构中包含叔丁氧羰基（Boc）保护的哌嗪基团，具有良好的溶解性和反应活性，适用于有机合成及药物研发。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为嘧啶类杂环衍生物，在生物化学研究中具有重要作用。其结构中的环戊并嘧啶核心可与多种生物靶点相互作用，尤其是激酶和核酸相关蛋白。哌嗪基团的引入增强了其与受体的结合能力，而 Boc 保护基团则便于后续衍生化反应。该分子在药物发现中常作为中间体或先导化合物，用于开发抗肿瘤、抗炎或抗感染类药物。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药研发领域，具体用途包括：

- 作为激酶抑制剂或信号通路调节剂的合成中间体；
- 用于构效关系研究，优化药物分子的活性和选择性；
- 在组合化学中构建杂环化合物库；
- 作为标准品或对照品用于分析方法的开发与验证。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光干燥保存，长期储存需充惰性气体保护。开封后需密封防潮，避免反复冻融。使用时应在干燥惰性气氛（如氮气）下操作，溶解推荐使用二甲基亚砜（DMSO）或二氯甲烷等有机溶剂。实验操作需佩戴防护手套、护目镜及实验服，确保通风良好。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC、核磁共振 (NMR) 及质谱 (MS) 严格检测, 符合高纯度标准。安全数据表明, 其可能对眼睛、皮肤和呼吸系统有刺激性, 操作时应避免直接接触。如发生意外接触, 需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需遵循当地法规, 不可随意丢弃。详细安全信息请参考产品材料安全数据表 (MSDS)。