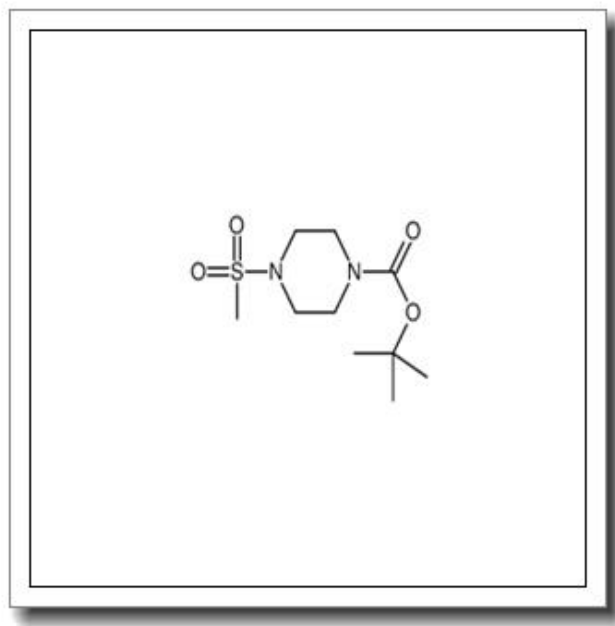


4-(甲基磺酰基)哌嗪-1-羧酸叔丁酯

tert-butyl 4-methylsulfonylpiperazine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 4-methylsulfonylpiperazine-1-carboxylate
中文名称	4-(甲基磺酰基)哌嗪-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	164331-38-8
分子式	C10H20N2O4S
分子量	264.342
纯度	≥96%

产品说明

4-(甲基磺酰基)哌嗪-1-羧酸叔丁酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 tert-butyl 4-methylsulfonylpiperazine-1-carboxylate, CAS 号 164331-38-8, 分子式 C₁₀H₂₀N₂O₄S, 分子量 264.342, 是一种白色至类白色结晶粉末。其结构中同时包含叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团和甲基磺酰基 (Ms) 活性基团, 赋予其独特的化学稳定性与反应活性。纯度 ≥96%, 易溶于有机溶剂如二氯甲烷、DMF, 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌嗪类衍生物, 该化合物在有机合成中兼具保护基与活化基的双重功能。Boc 基团可选择性保护氨基, 而甲基磺酰基作为优良的离去基团, 能参与亲核取代反应。这一特性使其成为构建复杂杂环化合物 (如药物分子骨架) 的关键中间体, 尤其在抗肿瘤、抗感染药物研发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药和农药中间体合成领域。具体用途包括:

- 1) 用于制备蛋白激酶抑制剂类抗癌药物的哌嗪环前体
- 2) 作为 HIV 蛋白酶抑制剂合成中的结构模块
- 3) 在不对称催化反应中作为手性配体的原料
- 4) 农药活性分子 (如杀菌剂) 的结构修饰

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 置于干燥、避光、-20℃至 4℃环境下, 避免与强氧化剂接触。使用时需在惰气 (如氮气) 保护下操作, 建议现配现用。溶解性测试表明, 推荐使用无水 DMF 或 THF 作为反应溶剂。长期储存需定期检测纯度。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据如下:

- 1) 危害标识: 刺激性物质 (H315-H319)

- 2) 防护措施: 佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套
- 3) 应急处理: 接触皮肤时立即用大量清水冲洗 15 分钟
- 4) 废弃物处置: 按危险化学品规范处理

注: 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。更多技术参数可索取 COA 报告。