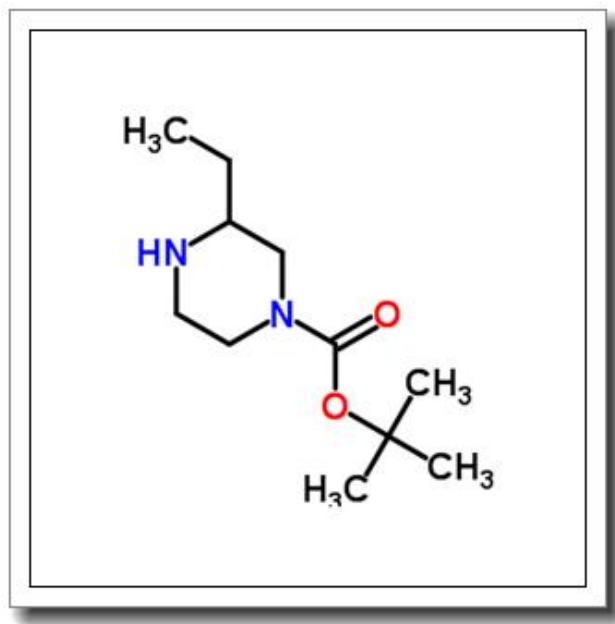


N-Boc-3-乙基哌嗪

tert-butyl 3-ethylpiperazine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 3-ethylpiperazine-1-carboxylate
中文名称	N-Boc-3-乙基哌嗪
CAS 号	438049-35-5
分子式	C ₁₁ H ₂₂ N ₂ O ₂
分子量	214.305
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

N-Boc-3-乙基哌嗪（化学名称：tert-butyl 3-ethylpiperazine-1-carboxylate）是一种重要的哌嗪类有机化合物，CAS 号为 438049-35-5，分子式为 C₁₁H₂₂N₂O₂，分子量为 214.305。该化合物以白色至类白色结晶或粉末形式存在，纯度通常不低于 96%。其结构中的 Boc（叔丁氧羰基）保护基团赋予其良好的稳定性，同时 3-位乙基取代基增加了分子的疏水性，使其在有机合成中具有独特的反应特性。

2. 生物化学功能与重要性

N-Boc-3-乙基哌嗪是医药和农药中间体合成的关键砌块，尤其在哌嗪环的结构修饰中发挥重要作用。Boc 保护基可在酸性条件下选择性脱除，而保留哌嗪环的碱性中心，这一特性使其成为多步合成中保护氨基的理想选择。此外，乙基取代基可调节化合物的脂溶性和空间位阻，影响其与生物靶标的相互作用。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于药物研发领域，特别是作为抗抑郁、抗精神病及抗菌药物的中间体。在农药化学中，它可用于合成具有特定生物活性的哌嗪类衍生物。此外，在材料科学中，其可作为配体或单体参与功能高分子材料的制备。具体用途包括但不限于：肽类化合物的固相合成、小分子抑制剂的结构优化以及手性催化剂的设计。

4. 储存条件与使用建议

建议在 2-8°C 的干燥环境中避光保存，长期储存需充入惰性气体保护。开封后应尽快使用，避免反复冻融或暴露于潮湿环境。使用时需在通风橱中操作，避免直接接触皮肤和眼睛。溶解性测试表明，该化合物易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂，微溶于水，建议根据反应体系选择适当溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行严格质量控制，确保批次间一致性。安全数据表明，其急性毒性较低（LD₅₀ 数据待补充），但仍需遵守化学品通用防护措施：佩

戴防护手套、护目镜和实验服。如意外吸入或接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地环保法规，建议通过专业化学品回收机构处置。

（注：实际文档中需补充具体毒理学数据和法规符合性声明，此处为通用模板。）