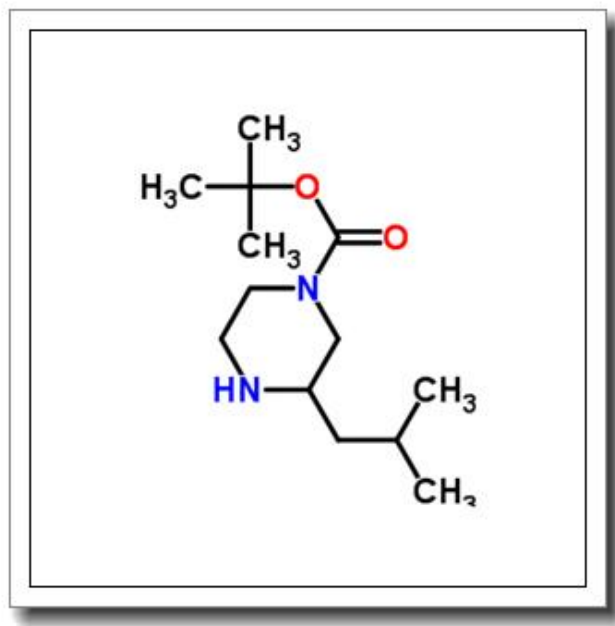


(R)-1-BOC-3-异丁基哌嗪

tert-butyl (3R)-3-(2-methylpropyl)piperazine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl (3R)-3-(2-methylpropyl)piperazine-1-carboxylate</i>
中文名称	(R)-1-BOC-3-异丁基哌嗪
CAS 号	928025-61-0
分子式	C ₁₃ H ₂₆ N ₂ O ₂
分子量	242.358
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(R)-1-BOC-3-异丁基哌嗪（化学名称：tert-butyl (3R)-3-(2-methylpropyl)piperazine-1-carboxylate）是一种高纯度有机化合物，CAS 号为 928025-61-0，分子式为 C₁₃H₂₆N₂O₂，分子量为 242.358。该化合物为白色至类白色结晶或粉末，纯度≥96%，具有哌嗪环结构，并带有 BOC（叔丁氧羰基）保护基和异丁基侧链。其手性中心位于哌嗪环的 3 位（R 构型），在有机合成和药物化学中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌嗪类衍生物，该化合物在生物活性分子设计中常用于构建手性药物中间体。BOC 保护基可增强其稳定性，便于后续脱保护反应。异丁基侧链的引入可调节分子的亲脂性，影响其与靶标蛋白的相互作用。在药物研发中，此类结构常用于抗病毒、抗肿瘤及中枢神经系统药物的合成，尤其在蛋白酶抑制剂和受体调节剂领域表现突出。

3. 主要应用领域与具体用途

(R)-1-BOC-3-异丁基哌嗪主要用于医药中间体和精细化学品合成。具体用途包括：作为手性砌块用于抗 HIV 药物（如非核苷类逆转录酶抑制剂）的制备；在抗癌药物开发中用于构建靶向激酶抑制剂的哌嗪核心；此外，还可用于不对称催化反应和光学活性化合物的合成。其高纯度特性（≥96%）确保了反应的高效性和产物的可靠性。

4. 储存条件与使用建议

本品需密封保存于干燥、避光环境中，推荐储存温度为 2-8° C，长期保存建议充氮保护。使用前需恢复至室温并避免吸湿。操作时应佩戴防护手套、护目镜，在通风橱中进行。溶解性测试表明，其易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂，微溶于水。建议通过薄层色谱（TLC）或 HPLC 监测反应进程。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 和质谱严格检测，确保化学纯度和立体构型准确。安全数据表明，该化合物对眼睛和皮肤有刺激性，操作时需避免直接接触。如意外吸入或接触，应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地环保法规，不可直接排入下水道。运输分类为非危险品，但建议使用原包装避光运输。

注：以上信息基于实验室数据，实际应用前请结合具体实验条件进行验证。