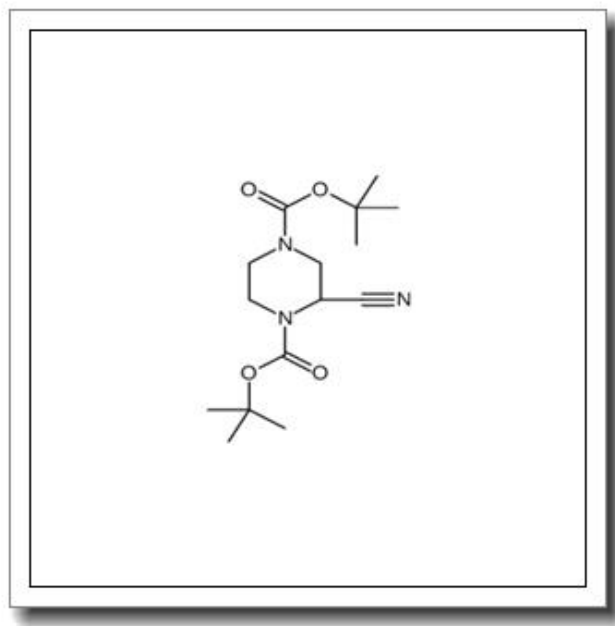


# (S)-2-氰基哌嗪-1,4-二羧酸二叔丁酯

*ditert-butyl (2S)-2-cyanopiperazine-1,4-dicarboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	ditert-butyl (2S)-2-cyanopiperazine-1,4-dicarboxylate
中文名称	(S)-2-氰基哌嗪-1,4-二羧酸二叔丁酯
CAS 号	1242267-80-6
分子式	C <sub>15</sub> H <sub>25</sub> N <sub>3</sub> O <sub>4</sub>
分子量	311.377
纯度	≥96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

(S)-2-氰基哌嗪-1,4-二羧酸二叔丁酯 (ditert-butyl (2S)-2-cyanopiperazine-1,4-dicarboxylate) 是一种高纯度有机化合物, CAS 号为 1242267-80-6, 分子式为  $C_{15}H_{25}N_3O_4$ , 分子量为 311.377。该化合物为白色至类白色固体, 纯度  $\geq 96\%$ , 具有明确的立体构型 (S 构型), 其结构中的氰基和叔丁酯基团赋予其独特的反应活性与稳定性。该产品易溶于常见有机溶剂 (如二氯甲烷、乙酸乙酯), 但在水中溶解度较低, 需注意避光、防潮保存。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为哌嗪类衍生物, 该化合物在生物化学领域具有重要价值。其氰基和羧酸酯基团可作为关键合成中间体, 参与多肽修饰、酶抑制剂设计及药物分子构建。S 构型的立体选择性使其在不对称合成中尤为突出, 常用于手性药物研发 (如抗病毒或抗肿瘤活性分子), 同时也是研究蛋白质-配体相互作用的工具化合物。

### 3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药研发与有机合成领域。具体用途包括: 1) 作为抗 HIV 蛋白酶抑制剂或激酶抑制剂的合成前体; 2) 用于构建含有哌嗪环结构的生物活性分子; 3) 在不对称催化反应中作为手性辅助试剂。此外, 其在材料科学中也可用于功能化高分子的改性研究。

### 4. 储存条件与使用建议

建议在  $-20^{\circ}C$  下密封保存, 长期储存需充惰性气体 (如氮气) 保护。使用前需恢复至室温并避免反复冻融。操作时应在通风橱中进行, 佩戴防护手套、护目镜及实验服。溶解推荐使用干燥的 DMF 或 THF, 若出现结块现象, 可通过温和加热 ( $\leq 40^{\circ}C$ ) 或超声处理助溶。

### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ , MS 和 NMR 验证结构准确性。安全数据表明, 该化合物对眼睛和皮肤有刺激性, 吸入或误服可能造成伤害, 需参照 MSDS (化学品安

全技术说明书) 处理。废弃物应作为有害化学废料处置, 避免直接接触水体或环境。实验记录需注明批号 (Lot No.) 以便溯源。