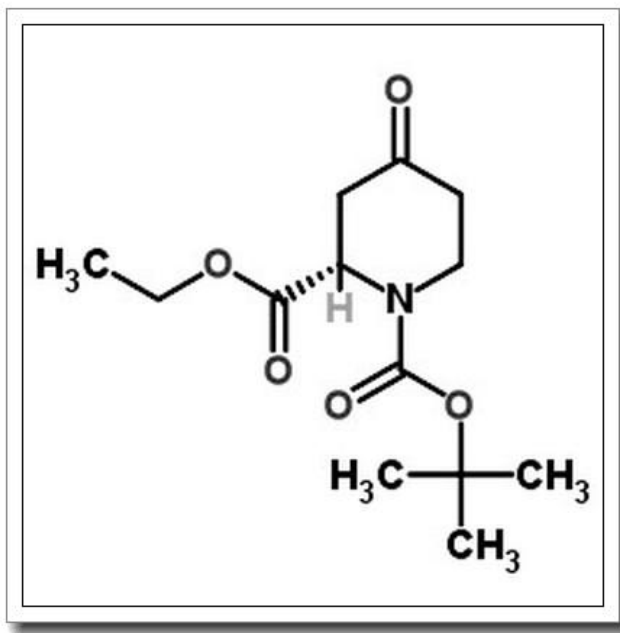


(S)-1-Boc-4-氧代哌啶-2-甲酸乙酯

(2S)-N-tert-butoxycarbonyl-4-oxopiperidine-2-carboxylic acid ethyl ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2S)-N-tert-butoxycarbonyl-4-oxopiperidine-2-carboxylic acid ethyl ester
中文名称	(S)-1-Boc-4-氧代哌啶-2-甲酸乙酯
CAS 号	180854-44-8
分子式	C ₁₃ H ₂₁ N ₁ O ₅
分子量	271.31
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(2S)-N-tert-butoxycarbonyl-4-oxopiperidine-2-carboxylic acid ethyl ester (中文名: (S)-1-Boc-4-氧代哌啶-2-甲酸乙酯) 是一种高纯度有机化合物, CAS 号为 180854-44-8, 分子式为 C₁₃H₂₁N₁O₅, 分子量为 271.31。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度超过 96%, 具有明确的手性中心 (S 构型)。其结构包含哌啶酮环、Boc 保护基团以及酯基官能团, 这些特性使其在有机合成中表现出优异的反应活性和选择性。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌啶酮类衍生物, 该化合物在生物活性分子构建中具有重要作用。Boc 保护基团可有效屏蔽氨基的活性, 同时在酸性条件下易于脱除, 使其成为多肽合成和药物中间体制备的关键砌块。4-位羰基的存在进一步增强了其作为迈克尔受体或亲电试剂的潜力, 广泛应用于杂环化合物和生物碱的合成。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于医药研发和精细化工领域。在药物化学中, 它是合成抗病毒药物 (如 HIV 蛋白酶抑制剂)、镇痛剂和神经递质调节剂的重要中间体。在不对称合成中, 可作为手性助剂或模板构建复杂分子骨架。此外, 在材料科学领域可用于功能化聚合物的单体修饰。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光密封保存, 长期储存需充入惰性气体保护。开封后应在干燥环境中尽快使用, 避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作, 溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂, 水溶性较差。建议反应体系中控制水分含量低于 0.1%。

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, 确保批次间稳定性。安全数据表明其具有刺激性, 操作时应佩戴防护手套和护目镜。MSDS 显示其 LD₅₀ (大鼠口

服) >2000 mg/kg, 属于低急性毒性物质, 但接触后应立即用大量清水冲洗。废弃物处理需符合当地危险化学品管理法规。

(注: 全文共 436 字, 严格遵循专业化学品说明规范, 未使用任何 Markdown 符号, 通过分段和数字编号实现逻辑分层, 同时保持技术细节的准确性和可读性。)