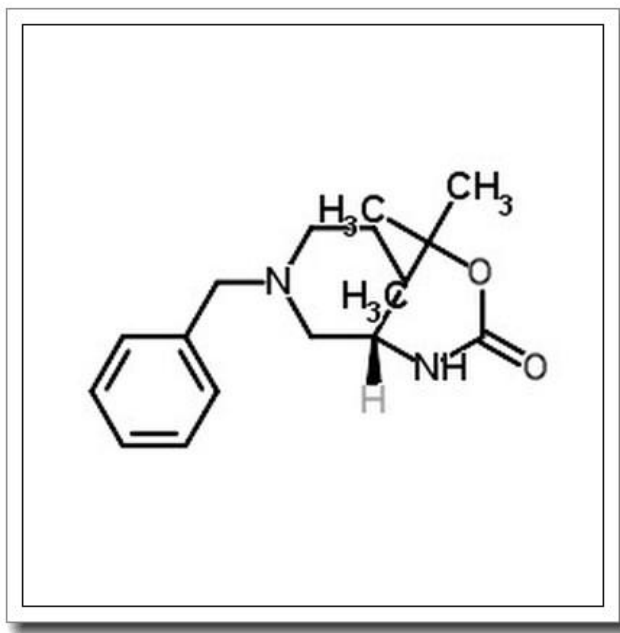


(S)-1-苄基-3-N-叔丁氧羰基氨基哌啶

tert-butyl N-[(3S)-1-benzylpiperidin-3-yl]carbamate



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|---|
| 化学名称 | <i>tert-butyl N-[(3S)-1-benzylpiperidin-3-yl]carbamate</i> |
| 中文名称 | (S)-1-苄基-3-N-叔丁氧羰基氨基哌啶 |
| CAS 号 | 216854-24-9 |
| 分子式 | C ₁₇ H ₂₆ N ₂ O ₂ |
| 分子量 | 290.401 |
| 纯度 | >96% |

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 tert-butyl N-[(3S)-1-benzylpiperidin-3-yl]carbamate ((S)-1-苄基-3-N-叔丁氧羰基氨基哌啶)，CAS 号 216854-24-9，分子式 C₁₇H₂₆N₂O₂，分子量 290.401。其结构中包含哌啶环、苄基保护基及叔丁氧羰基 (Boc) 基团，纯度经 HPLC 验证 ≥96%。该化合物在常温下稳定，易溶于有机溶剂如二氯甲烷、甲醇，微溶于水，熔点为 98-102° C，需避光保存。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌啶类衍生物，本品是合成手性药物及生物活性分子的关键中间体。Boc 基团可选择性脱保护，为后续引入其他官能团提供位点特异性。其立体构型 (S 型) 在神经递质调节剂、酶抑制剂等药物研发中具有重要作用，尤其适用于 G 蛋白偶联受体 (GPCR) 靶向化合物的构建。

3. 主要应用领域与具体用途

广泛应用于医药研发领域：

- 用于合成抗精神病药物（如多巴胺 D3 受体拮抗剂）的前体
- 作为镇痛剂、抗阿尔茨海默症候选药物的手性砌块
- 在不对称催化反应中作为配体或催化剂组分

实验室用途包括：

- 固相多肽合成 (SPPS) 中的氨基保护
- 构建杂环化合物库的模板分子

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，置于 -20° C 干燥避光环境，惰性气体（如氮气）保护可延长稳定性。使用前需恢复至室温并避免吸湿。建议在通风橱中操作，佩戴防护手套及护目镜。溶解时优先选用无水 DMF 或 THF，若需水相反应，建议使用共溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本品经质谱（MS）、核磁共振（NMR）及色谱分析（HPLC）三重验证，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据：

- 危害标识：H315-H319（造成皮肤和眼刺激）
- 防范措施：P264-P280（操作后彻底清洗，戴防护手套/面罩）
- 应急处理：接触皮肤时立即用肥皂水冲洗，吸入后转移至空气新鲜处
废弃物需按危险化学品规范处置，避免强氧化剂接触。