

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

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	(2S)-N-tert-butoxycarbonyl-4-oxopiperidine-2-carboxylic acid ethyl ester
产品目录号	
CAS 号	180854-44-8
分子式	C ₁₃ H ₂₁ N ₀₅
分子量	271.31
纯度	>96%

产品说明

(2S)-N-叔丁氧羰基-4-氧代哌啶-2-羧酸乙酯 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(2S)-N-tert-butoxycarbonyl-4-oxopiperidine-2-carboxylic acid ethyl ester，CAS 号 180854-44-8，分子式 C₁₃H₂₁N₁O₅，分子量 271.31。其结构中包含叔丁氧羰基（Boc）保护基团和哌啶酮环，具有手性中心（2S 构型），纯度经 HPLC 检测确认 ≥96%。该化合物在有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO 中具有良好的溶解性，但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌啶酮类衍生物，本品是合成手性药物和生物活性分子的关键中间体。Boc 保护基团可选择性脱除，便于后续官能团修饰，而 4-氧代哌啶结构常见于多种药物骨架中，如蛋白酶抑制剂和神经递质调节剂。其手性特征在不对称合成中尤为重要，可确保最终产物的立体化学纯度。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药研发和有机合成领域，具体用途包括：

- 作为手性砌块用于抗病毒药物（如 HIV 蛋白酶抑制剂）的合成
- 参与多肽模拟物和杂环化合物的构建
- 用于激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体（GPCR）靶向药物的结构优化
- 在学术研究中作为探针分子研究酶催化机制

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下密封保存，避免光照和潮湿环境。开封后需充入惰性气体（如氮气）保护。使用前需恢复至室温以防止结露，称量时建议在干燥环境中操作。溶解时可选用无水乙醇或二甲基亚砜（DMSO），配制成溶液后建议短期内使用完毕。

5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱（MS）和核磁共振（NMR）验证结构，并通过 HPLC 检测纯度。安全数据表明：

- 可能引起眼睛和皮肤刺激，操作时需佩戴防护手套和护目镜
- 避免吸入粉尘，应在通风橱中处理
- 如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医
- 废弃物处置需符合当地化学品管理法规

注：具体实验方案需根据实际研究需求优化，建议参考文献或咨询专业技术支持。