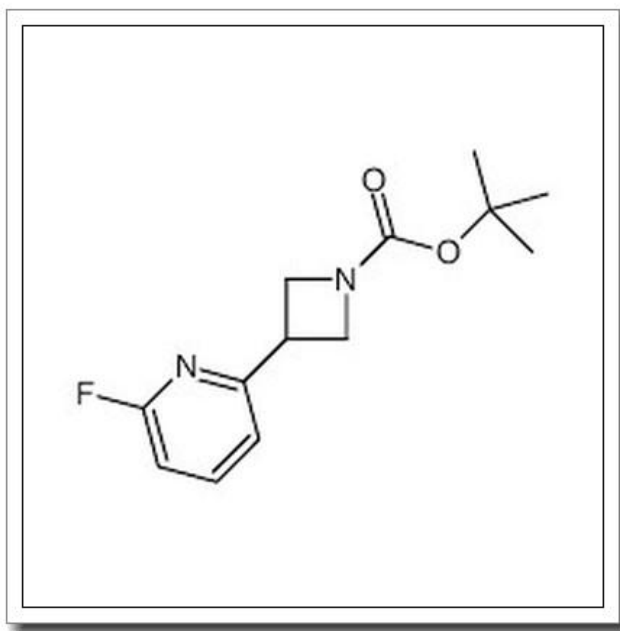


# 3-(6-氟吡啶-2-基)氮杂环丁烷-1-甲酸叔丁酯

*tert-butyl 3-(6-fluoropyridin-2-yl)azetidine-1-carboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 3-(6-fluoropyridin-2-yl)azetidine-1-carboxylate
中文名称	3-(6-氟吡啶-2-基)氮杂环丁烷-1-甲酸叔丁酯
CAS 号	1356109-81-3
分子式	C <sub>13</sub> H <sub>17</sub> FN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	252.285
纯度	>96%

## 产品说明

### 3-(6-氟吡啶-2-基)氮杂环丁烷-1-甲酸叔丁酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 tert-butyl 3-(6-fluoropyridin-2-yl)azetidine-1-carboxylate, CAS 号 1356109-81-3, 分子式 C<sub>13</sub>H<sub>17</sub>FN<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, 分子量 252.285。其结构中含氟吡啶基团与氮杂环丁烷骨架，具有高反应活性。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，熔点为 98-102° C，易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂，微溶于水。

#### 2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为关键医药中间体，其氮杂环丁烷结构可增强母体分子的刚性，而氟原子的引入能显著改善脂溶性与代谢稳定性。在药物设计中，常用于构建靶向激酶或 GPCR 受体的活性分子，尤其适用于中枢神经系统药物开发。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于创新药研发领域：

- 作为 ALK/ROS1 抑制剂类抗肿瘤药物的核心片段
- 用于合成神经退行性疾病治疗剂的哌啶替代物
- 在农药化学中作为新型杀虫剂的修饰基团

实验室用途包括：

- 通过 Boc 脱保护制备游离胺衍生物
- 钯催化交叉偶联反应的底物

#### 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，惰性气体保护可延长稳定性。开封后建议分装使用，避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作，佩戴防化手套与护目镜。溶解推荐使用无水级溶剂，反应温度不宜超过 80° C 以防 Boc 基团分解。

#### 5. 质量控制与安全信息

批次质检包含：

- 核磁共振 (1H/13C NMR) 验证结构
- 质谱 (LC-MS) 确认分子量
- 残留溶剂检测符合 ICH Q3C 标准

安全警示:

- 皮肤接触可能引起过敏反应 (GHS 分类 Skin Sens. 1)
- 吸入粉尘会导致呼吸道刺激 (GHS 分类 STOT SE 3)
- 应急处理: 接触眼部立即用生理盐水冲洗 15 分钟

废弃物处置需遵循当地危险化学品管理条例。

(注: 本说明基于现有研究数据, 实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。)