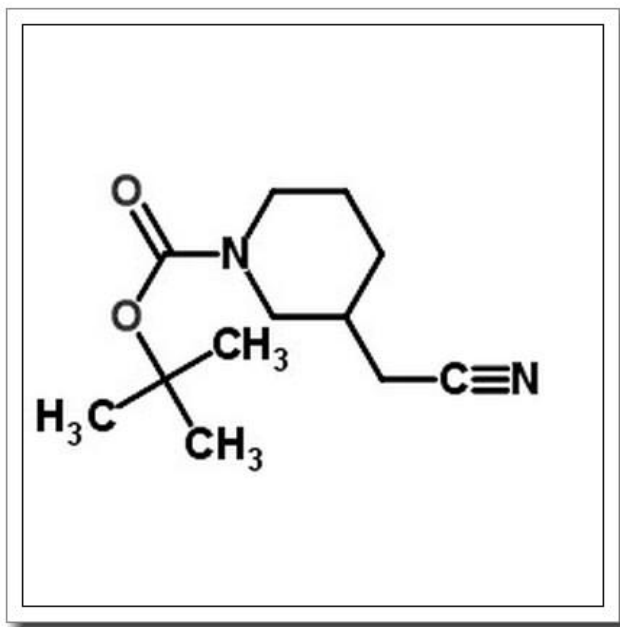


3-(氰基甲基)哌啶-1-羧酸叔丁酯

tert-Butyl 3-(cyanomethyl)piperidine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-Butyl 3-(cyanomethyl)piperidine-1-carboxylate
中文名称	3-(氰基甲基)哌啶-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	948015-72-3
分子式	C ₁₂ H ₂₀ N ₂ O ₂
分子量	224.299
纯度	>96%

产品说明

3-(氰基甲基)哌啶-1-羧酸叔丁酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 tert-Butyl 3-(cyanomethyl)piperidine-1-carboxylate, CAS 号为 948015-72-3, 分子式为 C₁₂H₂₀N₂O₂, 分子量为 224.299。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 纯度≥96%, 属于哌啶类衍生物, 具有叔丁氧羰基 (Boc) 保护基和氰甲基活性官能团。其结构中的 Boc 基团在酸性条件下易脱保护, 而氰甲基可作为后续反应的修饰位点, 适合用于有机合成及药物中间体制备。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌啶类生物碱的结构类似物, 本产品药物化学中常用于构建活性分子骨架。Boc 保护基可提高中间体的稳定性, 便于纯化和存储; 氰甲基的强吸电子特性使其成为亲核取代反应的理想底物。在蛋白酶抑制剂、神经递质调节剂等靶向药物研发中具有关键作用, 尤其适用于中枢神经系统药物先导化合物的结构优化。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要应用于以下领域:

- 医药中间体: 用于合成抗抑郁、抗帕金森病等神经类药物活性成分。
- 农药化学: 作为手性配体或结构单元参与杀虫剂、杀菌剂的分子设计。
- 科研试剂: 在有机方法学研究中用于探索新型 C-C 键偶联反应或环化反应。

4. 储存条件与使用建议

建议在-20° C、干燥惰性气体 (如氩气) 环境下避光保存, 开封后需充氮密封。使用前需恢复至室温以避免结露, 称量时需在通风橱中进行。本品易吸湿, 建议现配现用; 若需长期保存溶液, 建议添加分子筛除水。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度≥96%, 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据:

- 危险代码: H302 (吞咽有害), H315 (皮肤刺激)
- 防护措施: 佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套, 避免吸入粉尘或接触皮肤。

- 应急处理：若接触眼睛，立即用大量清水冲洗并就医；泄漏时用惰性吸附材料处理。

本产品仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。具体使用方案需结合实验目的进一步优化。