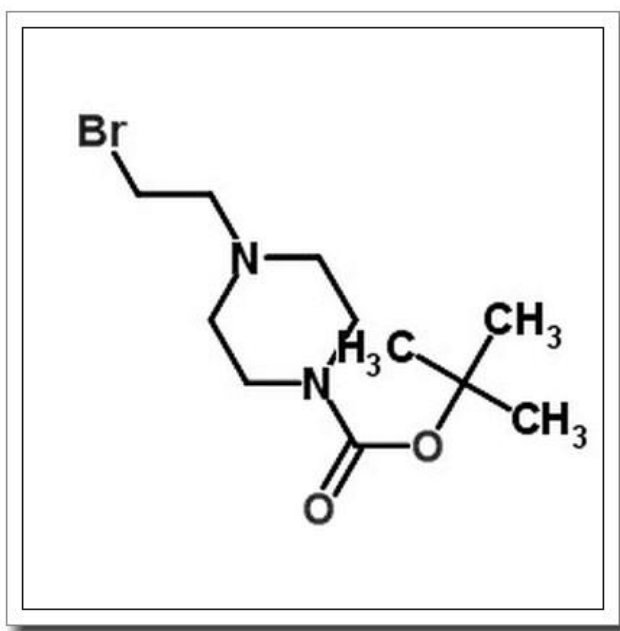


4-(2-溴乙基)-1-哌嗪羧酸-1,1-二甲基乙酯

tert-butyl 4-(2-bromoethyl)piperazine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 4-(2-bromoethyl)piperazine-1-carboxylate
中文名称	4-(2-溴乙基)-1-哌嗪羧酸-1,1-二甲基乙酯
CAS 号	655225-01-7
分子式	C ₁₁ H ₂₁ BrN ₂ O ₂
分子量	293.201
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

tert-butyl 4-(2-bromoethyl)piperazine-1-carboxylate (4-(2-溴乙基)-1-哌嗪羧酸-1,1-二甲基乙酯) 是一种重要的有机合成中间体, CAS 号为 655225-01-7, 分子式为 $C_{11}H_{21}BrN_2O_2$, 分子量为 293.201。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 纯度通常高于 96%。其结构包含哌嗪环和溴乙基官能团, 兼具良好的反应活性和稳定性, 适用于多种亲核取代反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌嗪类衍生物, 该化合物在药物化学和生物化学中具有广泛的应用价值。其溴乙基侧链可作为烷基化试剂, 用于构建含氮杂环结构, 而 Boc (叔丁氧羰基) 保护基团则便于后续脱保护反应。这类结构常见于抗肿瘤、抗抑郁及抗菌药物的研发中, 是合成复杂生物活性分子的关键砌块。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药中间体和精细化工领域。具体用途包括: 1) 作为多靶点激酶抑制剂的前体; 2) 用于合成哌嗪类抗精神病药物; 3) 在 PET (正电子发射断层扫描) 显影剂开发中作为标记前体。此外, 其还可用于材料科学中功能化聚合物的改性。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 的干燥环境中避光保存, 长期储存需充入惰性气体 (如氮气)。开封后应密封防潮, 避免与强氧化剂或酸碱接触。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、DMF 等有机溶剂, 水溶性较差。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测, 确保纯度 $\geq 96\%$ 。安全数据表明, 其对皮肤和眼睛有刺激性, 操作时应避免直接接触。如不慎吸入或误食, 需立即就医并提供

MSDS（材料安全数据表）。废弃物处理需符合当地环保法规，建议通过专业化学品回收机构处置。