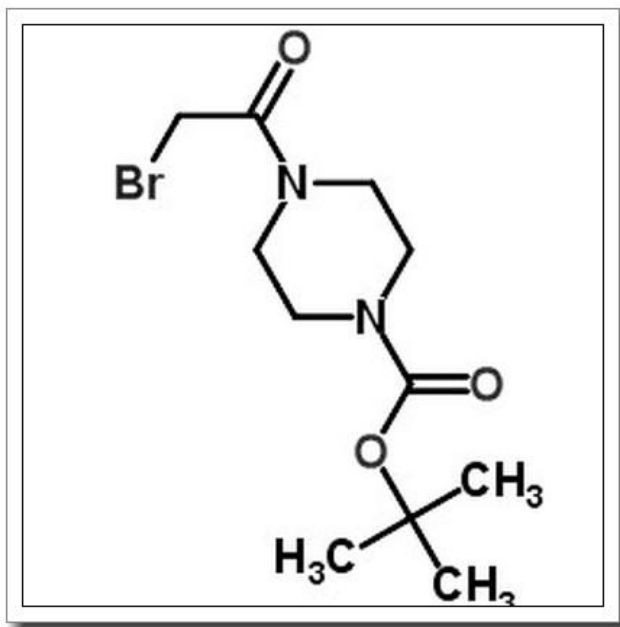


4-(2-溴乙酰基)哌嗪-1-羧酸叔丁酯

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



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl 4-(2-bromoacetyl)piperazine-1-carboxylate</i>
中文名称	4-(2-溴乙酰基)哌嗪-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	112257-12-2
分子式	C ₁₁ H ₁₉ BrN ₂ O ₃
分子量	307.184
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

4-(2-溴乙酰基)哌嗪-1-羧酸叔丁酯 (tert-butyl 4-(2-bromoacetyl)piperazine-1-carboxylate) 是一种重要的有机中间体, CAS 号为 112257-12-2, 分子式为 $C_{11}H_{19}BrN_2O_3$, 分子量为 307.184。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 纯度通常高于 96%。其结构中含有哌嗪环、叔丁氧羰基 (Boc) 保护基以及溴乙酰基官能团, 具有良好的反应活性, 尤其在酰胺键形成和亲核取代反应中表现突出。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在生物化学领域主要用于蛋白质修饰和药物分子设计。溴乙酰基可作为烷基化试剂, 与巯基 (-SH) 或氨基 (-NH₂) 发生特异性反应, 常用于抗体-药物偶联物 (ADC) 的合成或小分子抑制剂的开发。Boc 保护基的存在使其在固相多肽合成 (SPPS) 中具有重要价值, 可选择性脱保护以构建复杂肽链。

3. 主要应用领域与具体用途

- 药物研发: 作为关键中间体用于激酶抑制剂、抗肿瘤药物及神经递质调节剂的合成。
- 生物偶联: 通过溴乙酰基与生物大分子 (如抗体、蛋白质) 的巯基结合, 实现靶向递送系统构建。
- 材料科学: 用于功能化高分子材料的改性, 如制备具有特定生物活性的聚合物载体。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光干燥储存, 长期保存需充惰性气体 (如氮气) 保护。开封后需尽快使用, 避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜, 因其溴乙酰基可能对皮肤和黏膜产生刺激性。溶解推荐使用无水 DMF 或二氯甲烷等有机溶剂。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确认纯度 >96%, 并提供 COA (质量分析证书)。安全数据表

明, 该化合物属于刺激性化学品, UN 编号非管制, 但需避免吸入或接触。废弃处理应遵循当地法规, 建议通过专业化学废弃物渠道处置。急救措施包括: 皮肤接触时立即用大量清水冲洗, 误食需就医。