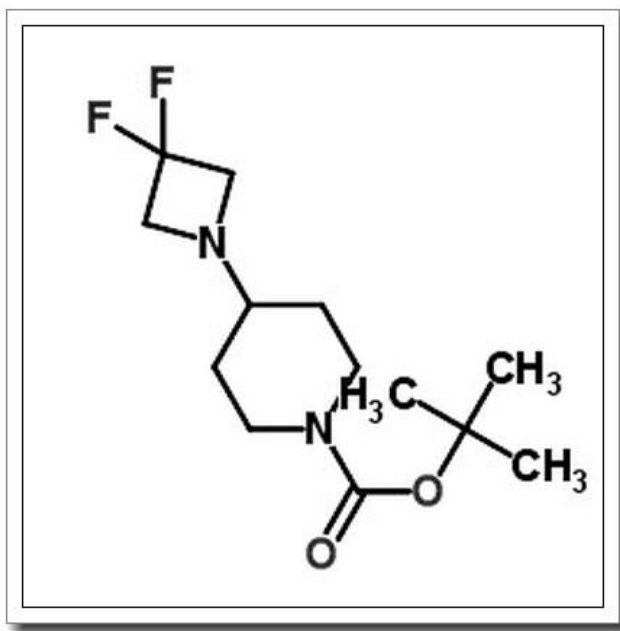


4-(3,3-二氟氮杂环丁烷-1-基)哌啶-1-羧酸叔丁酯

tert-Butyl 4-(3,3-difluoroazetidin-1-yl)piperidine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-Butyl 4-(3,3-difluoroazetidin-1-yl)piperidine-1-carboxylate</i>
中文名称	4-(3,3-二氟氮杂环丁烷-1-基)哌啶-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	1093066-74-0
分子式	C ₁₃ H ₂₂ F ₂ N ₂ O ₂
分子量	276.323
纯度	>96%

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 4-(3,3-二氟氮杂环丁烷-1-基)哌啶-1-羧酸叔丁酯，是一种含氟杂环化合物。其分子式为 C₁₃H₂₂F₂N₂O₂，分子量 276.323，CAS 号为 1093066-74-0。该化合物具有稳定的叔丁氧羰基(Boc)保护基团和刚性氮杂环丁烷结构，纯度经 HPLC 验证大于 96%，易溶于有机溶剂如 DMSO 和甲醇，但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌啶类衍生物，该化合物在药物化学中常用于构建活性分子骨架。其结构中的二氟氮杂环丁烷可增强代谢稳定性，而 Boc 保护基团在合成过程中提供选择性脱保护优势。该分子在调节生物活性方面表现出显著潜力，尤其适用于中枢神经系统药物和酶抑制剂的开发。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于医药中间体合成，特别是在以下领域：

- 作为激酶抑制剂和 GPCR 配体的关键结构单元
- 用于构建抗肿瘤和抗炎药物的核心杂环体系
- 在 PET 示踪剂开发中作为含氟前体化合物

实验室研究中，建议使用量范围为 5-50 毫克，具体需根据合成路线优化。

4. 储存条件与使用建议

储存于密封容器中，置于-20° C 干燥避光环境，可稳定保存 24 个月。使用前需恢复至室温并干燥处理。操作时应在通风橱中进行，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。建议使用玻璃或聚四氟乙烯材质器具盛装，避免与强氧化剂共存。

5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱(MS)、核磁共振(NMR)和高效液相色谱(HPLC)三重验证，符合药物研发级标准。安全数据表明其 LD₅₀(大鼠口服) > 2000 mg/kg，但仍需佩戴防护手套

和护目镜。废弃物应作为有害化学品处理，遵守当地环保法规。如发生接触，立即用大量清水冲洗并就医。

（注：实际应用前请查阅最新版物质安全数据表(MSDS)并开展小试验证）