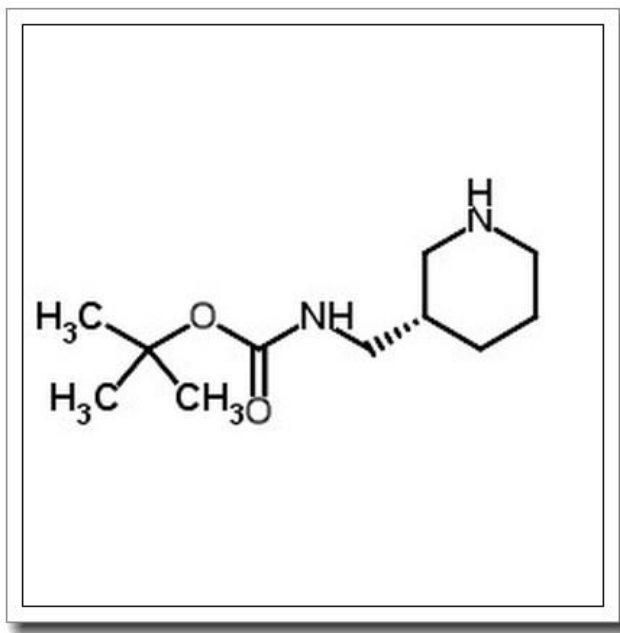


哌啶-3-基甲基-氨基甲酸叔丁基酯

(S)-1-piperidin-3-ylmethylcarbamic acid tert-butyl ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	(S)-1-piperidin-3-ylmethylcarbamic acid tert-butyl ester
中文名称	哌啶-3-基甲基-氨基甲酸叔丁基酯
CAS 号	1016167-99-9
分子式	C ₁₁ H ₂₂ N ₂ O ₂
分子量	214.305
纯度	>96%

产品说明

产品名称: (S)-1-哌啶-3-基甲基-氨基甲酸叔丁基酯

CAS 号: 1016167-99-9

分子式: C₁₁H₂₂N₂O₂

分子量: 214.305

纯度: >96%

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(S)-1-哌啶-3-基甲基-氨基甲酸叔丁基酯, 是一种手性哌啶衍生物。其分子结构中包含叔丁氧羰基(Boc)保护基团, 赋予其良好的化学稳定性。该化合物易溶于有机溶剂如二氯甲烷、甲醇和乙酸乙酯, 但在水中溶解度较低。其手性中心位于哌啶环的3位, 光学纯度通常通过HPLC测定。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌啶类生物碱的合成中间体, 本品在药物化学中具有重要价值。其Boc保护基可在酸性条件下选择性脱除, 暴露游离氨基, 便于后续衍生化反应。哌啶环结构广泛存在于神经递质调节剂和GPCR靶向药物中, 因此该化合物是构建中枢神经系统药物(如镇痛剂、抗精神病药)的关键砌块。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于以下领域:

- 医药研发: 作为API合成中间体, 用于制备含哌啶结构的候选药物分子
- 不对称合成: 作为手性助剂参与立体选择性反应
- 保护基化学: 通过Boc基团的引入/脱除实现氨基的保护与去保护

典型应用案例包括:

- 1) 5-HT受体调节剂的合成
- 2) 多巴胺D3选择性拮抗剂的制备
- 3) 用于构建天然产物类似物的哌啶核心结构

4. 储存条件与使用建议

储存条件：应密封保存于 2-8℃干燥环境中，避免光照和湿气。长期储存建议充入惰性气体（如氮气）。

使用建议：

- 称取前需平衡至室温以防止吸湿
- 建议在通风橱中操作，避免直接吸入粉尘
- 溶解性测试推荐先尝试甲醇或 DMSO 等极性溶剂

5. 质量控制与安全信息

质量控制：

- 纯度通过 HPLC (UV 254nm) 测定，批间差异<2%
- 手性纯度 $\geq 98\%$ ee (手性柱分析确认)

安全信息：

- 危险代码：Xi (刺激性物质)
- 安全术语：S22 (勿吸入粉尘)，S24/25 (避免接触皮肤和眼睛)
- 应急处理：如接触眼睛，立即用大量清水冲洗并就医