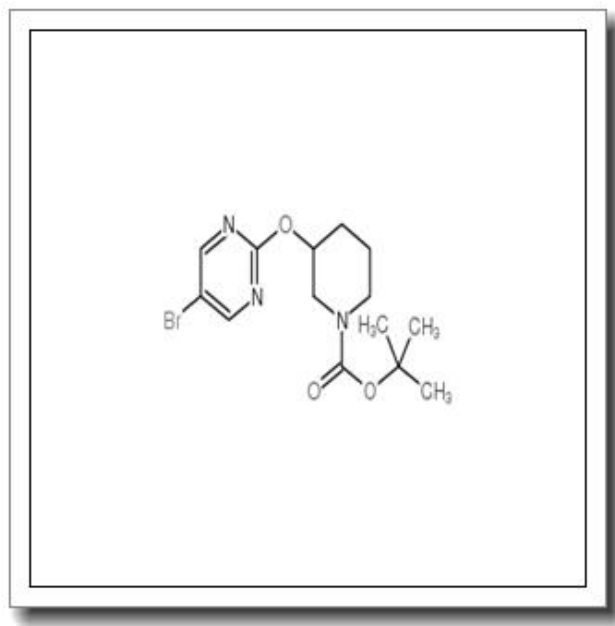


1-Boc-3-(5-溴嘧啶-2-基氧基)哌啶

tert-butyl 3-(5-bromopyrimidin-2-yl)oxypiperidine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl 3-(5-bromopyrimidin-2-yl)oxypiperidine-1-carboxylate</i>
中文名称	1-Boc-3-(5-溴嘧啶-2-基氧基)哌啶
CAS 号	914347-76-5
分子式	C ₁₄ H ₂₀ BrN ₃ O ₃
分子量	358.231
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 tert-butyl 3-(5-bromopyrimidin-2-yl)oxypiperidine-1-carboxylate (1-Boc-3-(5-溴嘧啶-2-基氧基)哌啶)，CAS 号为 914347-76-5，分子式 C₁₄H₂₀BrN₃O₃，分子量 358.231。其结构包含嘧啶环与哌啶环通过醚键连接，并受 Boc 基团保护，纯度 ≥96%。该化合物在常温下稳定，易溶于有机溶剂如 DMSO、DMF，微溶于水，需避光保存以避免光解反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为嘧啶类衍生物，该化合物是重要的医药中间体，尤其适用于激酶抑制剂和抗肿瘤药物的合成。其 5-溴嘧啶结构可作为亲电位点参与偶联反应，而 Boc 保护的哌啶环能进一步脱保护生成活性氨基，在构建杂环化合物中具有关键作用。此类结构常见于靶向药物设计，如 EGFR 或 CDK 抑制剂开发。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于以下领域：

1. 药物研发：作为小分子抑制剂的核心骨架，用于抗肿瘤、抗病毒药物先导化合物优化。
2. 有机合成：通过 Suzuki 偶联等反应引入芳基或杂芳基，扩展分子多样性。
3. 生化研究：作为探针分子研究激酶信号通路机制。典型应用案例包括 PARP 抑制剂和 BRD4 蛋白抑制剂的合成。

4. 储存条件与使用建议

储存于 -20° C 至 4° C 的干燥环境中，密封避光保存，保质期 24 个月。使用时需在惰性气体（如氮气）保护下操作，避免接触强氧化剂或酸碱环境。建议溶解于无水 DMSO 后分装使用，减少反复冻融导致的降解。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 ≥96%，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明，其急性毒性较低 (LD₅₀ > 500 mg/kg, 大鼠口服)，但仍需佩戴防护手套及护目镜操作。MSDS

显示其对眼睛和皮肤有轻微刺激性，若接触需立即用大量清水冲洗。废弃物应作为有害化学品处置，遵守当地环保法规。