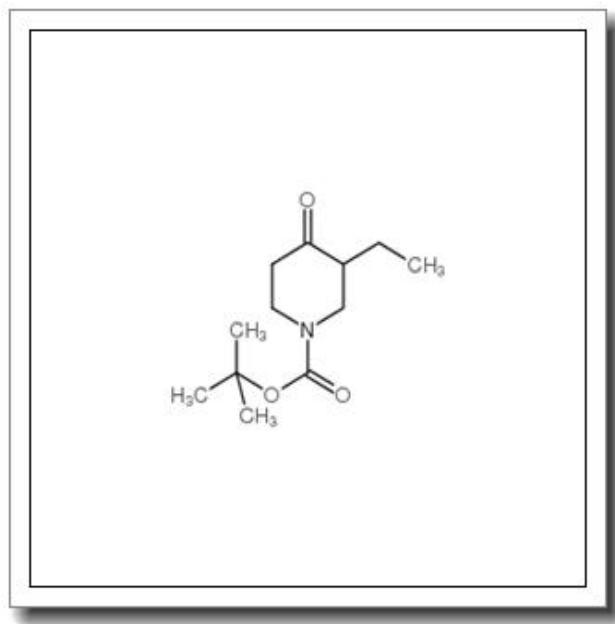


1-Boc-3-乙基-4-哌啶酮

tert-butyl 3-ethyl-4-oxopiperidine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 3-ethyl-4-oxopiperidine-1-carboxylate
中文名称	1-Boc-3-乙基-4-哌啶酮
CAS 号	117565-57-8
分子式	C ₁₂ H ₂₁ N ₃ O ₃
分子量	227.3
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 tert-butyl 3-ethyl-4-oxopiperidine-1-carboxylate (1-Boc-3-乙基-4-哌啶酮), CAS 号为 117565-57-8, 分子式为 C₁₂H₂₁N₃O₃, 分子量为 227.3。它是一种白色至类白色结晶粉末, 纯度 ≥96%, 具有典型的哌啶酮骨架结构, 并带有 Boc (叔丁氧羰基) 保护基团。该化合物在有机溶剂如二氯甲烷、乙醇和乙酸乙酯中具有良好的溶解性, 但在水中溶解度较低。其化学稳定性较高, 但在强酸或强碱条件下可能发生 Boc 基团的水解。

2. 生物化学功能与重要性

1-Boc-3-乙基-4-哌啶酮是一种重要的医药中间体, 其哌啶酮结构在药物化学中广泛用于构建生物活性分子的核心骨架。Boc 保护基的存在使其在合成过程中能够选择性脱保护, 从而避免副反应的发生。该化合物在构建镇痛剂、抗精神病药物和抗肿瘤药物的关键步骤中具有重要价值, 尤其在多步合成中表现出优异的反应可控性。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药研发和有机合成领域, 具体用途包括但不限于: 作为合成哌啶类衍生物的前体, 用于制备具有中枢神经系统活性的药物分子; 在抗肿瘤药物研发中作为中间体, 参与构建靶向激酶抑制剂的核心结构; 此外, 还可用于材料科学中功能性聚合物的合成。其高纯度和稳定性使其成为实验室和工业化生产的理想选择。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品密封保存于干燥、阴凉的环境中, 避免光照和潮湿, 储存温度以 2-8°C 为宜。开封后应充入惰性气体 (如氮气) 以延长保存期限。使用时需在通风良好的条件下操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。建议佩戴防护手套、护目镜和实验服, 并在化学通风橱中进行称量和溶解操作。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱等多种分析方法严格质量控制, 确保纯度 ≥96%。安

全信息方面，该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸道有轻微刺激性，操作时应避免产生粉尘。如不慎接触，应立即用大量清水冲洗，并寻求医疗帮助。废弃物应按照当地法规处理，不可随意排放。详细的安全数据可参考提供的MSDS（材料安全数据表）。