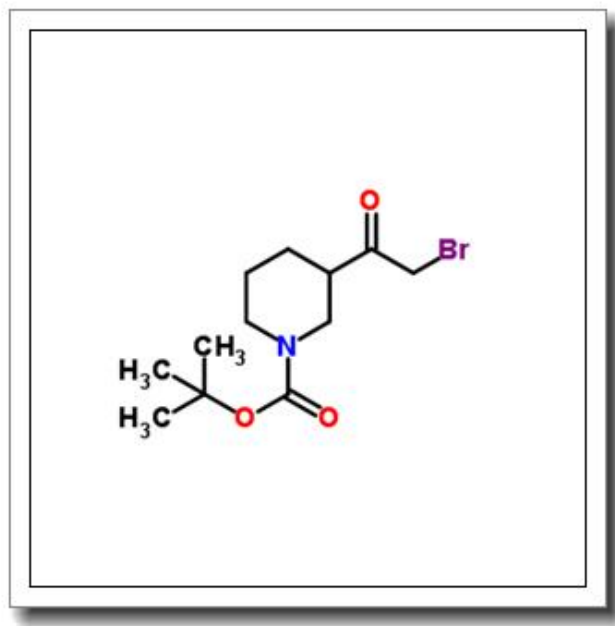


3-(2-溴乙酰基)哌啶-1-羧酸叔丁酯

tert-Butyl 3-(2-bromoacetyl)piperidine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-Butyl 3-(2-bromoacetyl)piperidine-1-carboxylate</i>
中文名称	3-(2-溴乙酰基)哌啶-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	1219813-78-1
分子式	C ₁₂ H ₂₀ BrN ₃ O ₃
分子量	306.196
纯度	≥ 96%

产品说明

3-(2-溴乙酰基)哌啶-1-羧酸叔丁酯产品说明

1. 产品概述与化学特性

3-(2-溴乙酰基)哌啶-1-羧酸叔丁酯 (tert-Butyl 3-(2-bromoacetyl)piperidine-1-carboxylate) 是一种重要的有机中间体, CAS 号为 1219813-78-1, 分子式为 $C_{12}H_{20}BrNO_3$, 分子量为 306.196。该化合物为白色至类白色固体, 纯度通常 $\geq 96\%$ 。其结构包含哌啶环、溴乙酰基和叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团, 具有较高的反应活性, 尤其在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药物分子设计和合成。其溴乙酰基可作为烷基化试剂, 与巯基或氨基等亲核基团反应, 形成稳定的共价键。Boc 保护基团的存在使其在肽类和多步有机合成中具有重要价值, 能够选择性脱保护并进一步修饰哌啶环结构。

3. 主要应用领域与具体用途

3-(2-溴乙酰基)哌啶-1-羧酸叔丁酯广泛应用于医药研发和有机合成领域。具体用途包括:

- 作为关键中间体用于合成激酶抑制剂、抗肿瘤药物和神经活性化合物。
- 用于构建哌啶类衍生物, 扩展药物分子库。
- 在 PROTAC (蛋白降解靶向嵌合体) 技术中用于连接配体的合成。

4. 储存条件与使用建议

该化合物需在干燥、避光条件下保存, 推荐储存温度为 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 。开封后应充入惰性气体 (如氮气) 以延长稳定性。使用时需在通风橱中操作, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。建议使用干燥的玻璃器皿和非质子性溶剂 (如 DMF、DCM) 溶解。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 严格检测, 确保纯度 $\geq 96\%$ 。安全信息如下:

- 危险类别: 刺激性物质, 可能引起皮肤和眼睛刺激。
- 防护措施: 佩戴防护手套、护目镜和实验服, 避免吸入或接触。
- 废弃物处理: 按有机卤化物废弃物标准处理, 遵守当地环保法规。

如需进一步技术资料或 COA (质量分析证书), 请联系供应商获取。