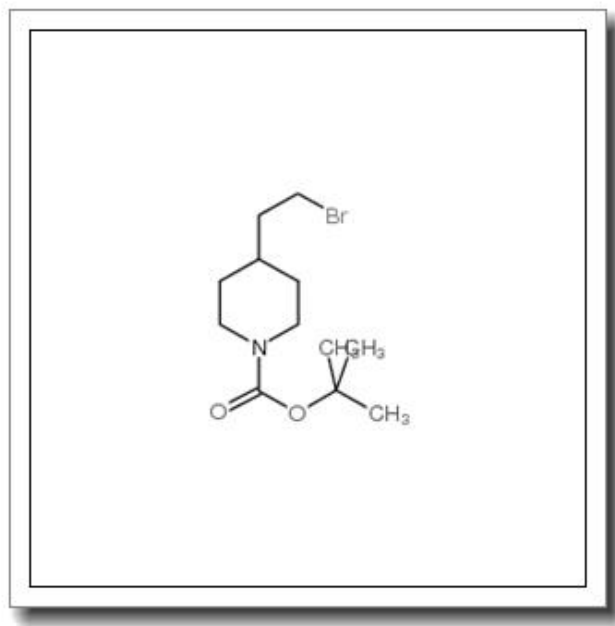


4-(2-溴乙基)哌啶-1-羧酸叔丁酯

tert-butyl 4-(2-bromoethyl)piperidine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 4-(2-bromoethyl)piperidine-1-carboxylate
中文名称	4-(2-溴乙基)哌啶-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	169457-73-2
分子式	C ₁₂ H ₂₂ BrN ₂ O ₂
分子量	292.213
纯度	≥ 96%

产品说明

4-(2-溴乙基)哌啶-1-羧酸叔丁酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 tert-butyl 4-(2-bromoethyl)piperidine-1-carboxylate, 中文名 4-(2-溴乙基)哌啶-1-羧酸叔丁酯, CAS 号 169457-73-2, 分子式 C₁₂H₂₂BrNO₂, 分子量 292.213。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 纯度 ≥96%, 具有典型的哌啶环结构和溴乙基活性官能团, 易溶于有机溶剂如二氯甲烷、乙酸乙酯, 微溶于水。其叔丁氧羰基 (Boc) 保护基赋予其良好的稳定性, 适用于多步合成反应。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌啶类衍生物, 该化合物是药物化学和有机合成中关键的手性中间体。溴乙基侧链可通过亲核取代反应进一步功能化, 而 Boc 保护基可在酸性条件下选择性脱除, 使其成为构建复杂分子 (如生物碱、神经递质类似物) 的重要砌块。在蛋白酶抑制剂和 GPCR 靶向药物的研发中具有广泛应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于以下领域:

- 3.1 医药中间体: 用于合成抗抑郁药、镇痛药及抗肿瘤化合物的哌啶骨架修饰。
- 3.2 材料科学: 作为液晶材料或高分子单体的前体。
- 3.3 科研用途: 用于激酶抑制剂或神经科学相关分子的结构优化研究。

4. 储存条件与使用建议

储存于-20° C 至 4° C 的干燥环境中, 避光密封保存。开封后建议充氮保护以延长稳定性。使用时应佩戴防护手套、护目镜, 在通风橱中操作, 避免吸入粉尘或接触皮肤。溶解推荐使用无水级有机溶剂, 反应体系需严格除水以提高产率。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC、NMR 和质谱进行批次纯度验证, 残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明, 该产品对眼睛和皮肤有刺激性, GHS 分类为 H315-H319-H335。泄露处理需使用惰性吸附材料收集, 废弃处置应遵循当地化学品管理法规。

(全文共计 436 字)