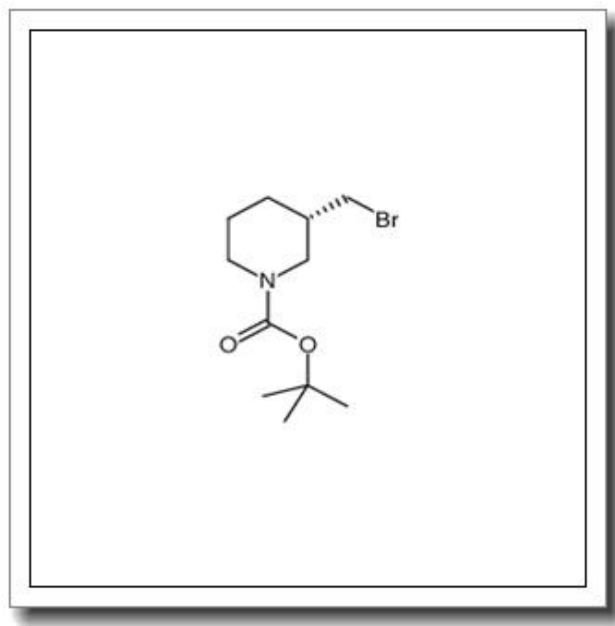


(S)-3-(溴甲基)哌啶-1-羧酸叔丁酯

tert-butyl (3S)-3-(bromomethyl)piperidine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl (3S)-3-(bromomethyl)piperidine-1-carboxylate</i>
中文名称	(S)-3-(溴甲基)哌啶-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	158406-99-6
分子式	C ₁₁ H ₂₀ BrN ₂ O ₂
分子量	278.186
纯度	≥ 96%

产品说明

(S)-3-(溴甲基)哌啶-1-羧酸叔丁酯产品说明

1. 产品概述与化学特性

(S)-3-(溴甲基)哌啶-1-羧酸叔丁酯 (英文名称: tert-butyl (3S)-3-(bromomethyl)piperidine-1-carboxylate) 是一种重要的手性哌啶衍生物, CAS 号为 158406-99-6, 分子式为 $C_{11}H_{20}BrNO_2$, 分子量 278.186。该化合物为无色至淡黄色液体或低熔点固体, 纯度通常 $\geq 96\%$ 。其结构中的叔丁氧羰基 (Boc) 保护基和溴甲基官能团使其成为有机合成中的关键中间体, 尤其在不对称合成和药物化学中具有重要价值。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为手性砌块, 能够通过溴甲基的活泼反应性进一步衍生化, 参与碳-碳键或碳-杂原子键的构建。其 Boc 保护基在酸性条件下可选择性脱除, 为哌啶环的后续修饰提供便利。在生物活性分子合成中, 哌啶骨架广泛存在于天然产物和药物分子中, 例如抗肿瘤、抗病毒及中枢神经系统药物。

3. 主要应用领域与具体用途

(S)-3-(溴甲基)哌啶-1-羧酸叔丁酯主要用于以下领域:

- 药物研发: 作为手性中间体, 用于合成靶向 G 蛋白偶联受体 (GPCR) 或酶抑制剂的候选药物。
- 不对称催化: 参与过渡金属催化的偶联反应, 构建复杂手性分子。
- 材料科学: 用于功能化聚合物的单体设计。

4. 储存条件与使用建议

建议在 $-20^{\circ}C$ 至 $4^{\circ}C$ 的干燥惰性气体 (如氮气) 环境中避光保存, 避免与水分或强氧化剂接触。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。开封后应尽快使用, 剩余试剂需严格密封。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和 NMR 确保纯度 $\geq 96\%$, 并提供 COA (质量分析证书)。安全信息

如下:

- 危险性: 对皮肤、眼睛和呼吸道有刺激性, 可能引起灼伤。
- 应急处理: 接触皮肤时立即用大量清水冲洗, 就医; 吸入后转移至空气新鲜处。
- 运输分类: UN 3265, 腐蚀性液体, 按危险化学品规范运输。

本产品仅供科研用途, 不适用于医药或食品领域。使用前请查阅材料安全数据表 (MSDS) 并遵循实验室安全规程。