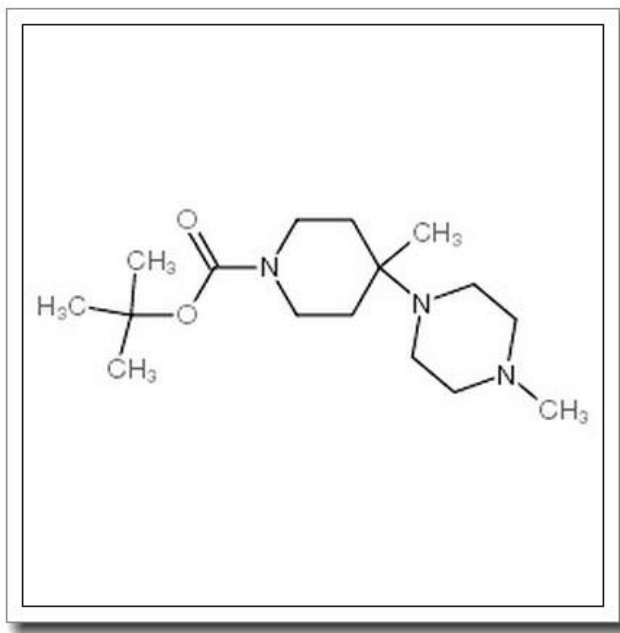


1-Boc-4-甲基-4-(4-甲基哌嗪-1-基)哌啶

tert-butyl 4-methyl-4-(4-methylpiperazin-1-yl)piperidine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl 4-methyl-4-(4-methylpiperazin-1-yl)piperidine-1-carboxylate</i>
中文名称	1-Boc-4-甲基-4-(4-甲基哌嗪-1-基)哌啶
CAS 号	864369-94-8
分子式	C ₁₆ H ₃₁ N ₃ O ₂
分子量	297.436
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

1-Boc-4-甲基-4-(4-甲基哌嗪-1-基)哌啶 (CAS 号: 864369-94-8) 是一种哌啶类衍生物, 化学式为 $C_{16}H_{31}N_3O_2$, 分子量为 297.436。该化合物以白色至类白色固体形式存在, 纯度通常高于 96%。其结构包含一个 Boc (叔丁氧羰基) 保护基团、一个哌啶环以及一个 4-甲基哌嗪取代基, 具有较高的化学稳定性和溶解性, 可溶于常见有机溶剂如二氯甲烷、甲醇和乙腈。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在有机合成和药物化学中具有重要价值, 常作为中间体用于构建更复杂的分子结构。其哌嗪和哌啶环结构是许多生物活性分子的核心骨架, 尤其在神经递质调节剂、抗精神病药物和抗癌药物的研发中广泛应用。Boc 保护基的存在使其在合成过程中易于脱保护, 从而进一步衍生化。

3. 主要应用领域与具体用途

1-Boc-4-甲基-4-(4-甲基哌嗪-1-基)哌啶主要用于药物研发领域, 特别是作为多靶点激酶抑制剂和 G 蛋白偶联受体 (GPCR) 调节剂的合成前体。具体用途包括:

- 作为抗肿瘤药物候选分子的关键中间体
- 用于中枢神经系统 (CNS) 药物设计中的结构修饰
- 在组合化学和高通量筛选中作为构建模块

4. 储存条件与使用建议

该产品需在干燥、避光条件下保存, 推荐储存温度为 2-8° C, 长期保存建议置于惰性气体 (如氮气) 环境中。使用前需恢复至室温并避免暴露于湿气。操作时应佩戴防护手套、护目镜和实验服, 并在通风良好的环境中进行。

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 >96%。安全信息如下:

- 可能对皮肤、眼睛和呼吸道有刺激性
- 避免吸入粉尘或接触皮肤

- 如意外接触，立即用大量清水冲洗并就医
- 废弃物应按照当地法规处理

该产品仅供科研使用，不适用于医药、食品或其他非实验用途。