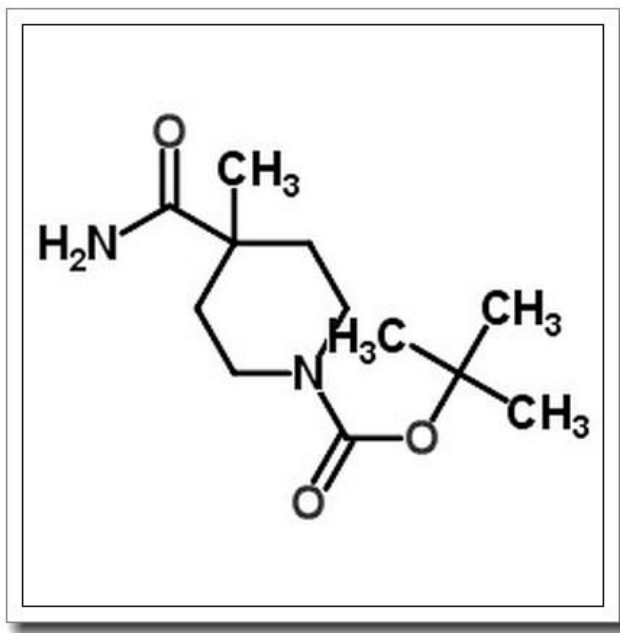


1-Boc-4-甲基-4-哌啶甲酰胺

tert-butyl 4-carbamoyl-4-methylpiperidine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-butyl 4-carbamoyl-4-methylpiperidine-1-carboxylate</i>
中文名称	1-Boc-4-甲基-4-哌啶甲酰胺
CAS 号	343788-67-0
分子式	C ₁₂ H ₂₂ N ₂ O ₃
分子量	242.315
纯度	>96%

产品说明

1-Boc-4-甲基-哌啶甲酰胺产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 tert-butyl 4-carbamoyl-4-methylpiperidine-1-carboxylate (CAS 号: 343788-67-0), 中文命名为 1-Boc-4-甲基-哌啶甲酰胺, 是一种高纯度有机合成中间体。其分子式为 C₁₂H₂₂N₂O₃, 分子量为 242.315, 外观通常为白色至类白色结晶性粉末。该化合物在 Boc (叔丁氧羰基) 保护基和酰胺基团的共同作用下, 表现出良好的化学稳定性, 可溶于常见有机溶剂如二氯甲烷、DMF 和 THF, 但在水中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌啶类衍生物, 该分子在药物化学中具有关键作用。Boc 保护基可选择性脱除, 为后续官能团修饰提供便利; 而 4 位甲基和甲酰胺结构能显著影响分子的空间构象和氢键结合能力, 使其成为构建激酶抑制剂、神经递质调节剂等活性分子的重要骨架。其高纯度特性 (>96%) 确保了反应的可重复性和产物收率。

3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于医药研发和精细化工领域, 具体包括: 1) 作为抗肿瘤药物 (如 PARP 抑制剂) 合成中的关键中间体; 2) 用于构建中枢神经系统药物 (如镇痛剂或抗抑郁剂) 的哌啶环结构; 3) 在不对称催化反应中作为手性配体的前体。实验表明, 其衍生物可显著增强靶标蛋白的结合亲和力。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 至 4° C 的干燥环境中避光保存, 长期储存需充入惰性气体保护。开封后应避免反复冻融, 建议分装使用。实验操作时需在通风橱中进行, 佩戴防护手套和护目镜。溶解性测试推荐先以少量 DMSO 助溶, 再稀释至目标溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 ≥96%, MS 和 NMR 谱图验证结构准确性。安全数据表明, 其急性毒性较低 (LD₅₀ 未明确), 但仍可能引起眼睛和皮肤刺激。如意外接触,

需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理应遵守当地化学品管理法规，避免直接排放至环境中。

（注：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合用户实际工艺验证。）