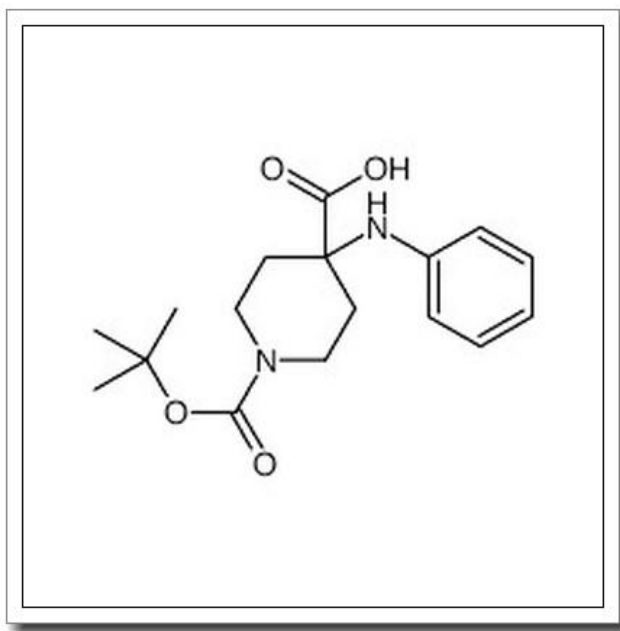


1-(叔丁氧基羰基)-4-(苯基氨基)哌啶-4-羧酸

4-anilino-1-tert-butoxycarbonyl-piperidine-4-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-anilino-1-tert-butoxycarbonyl-piperidine-4-carboxylic acid
中文名称	1-(叔丁氧基羰基)-4-(苯基氨基)哌啶-4-羧酸
CAS 号	1159835-31-0
分子式	C ₁₇ H ₂₄ N ₂ O ₄
分子量	320.383
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为 4-anilino-1-tert-butoxycarbonyl-piperidine-4-carboxylic acid (1-(叔丁氧基羰基)-4-(苯基氨基)哌啶-4-羧酸), CAS 号 1159835-31-0, 分子式 C₁₇H₂₄N₂O₄, 分子量 320.383。该化合物是一种哌啶衍生物, 结构中含有叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团和苯胺基团, 纯度经 HPLC 验证大于 96%。常温下为白色至类白色结晶性粉末, 可溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇和氯仿, 微溶于水。其化学特性表现为酸碱两性, Boc 基团在酸性条件下易脱保护, 需避免强酸环境。

2. 生物化学功能与重要性

本产品作为哌啶羧酸类化合物, 在药物化学和有机合成中具有重要价值。其分子中的 Boc 保护基团可选择性脱除, 便于后续官能团修饰; 苯胺基团则赋予其参与亲核取代或偶联反应的潜力。该结构片段常见于生物活性分子的构建, 尤其是中枢神经系统药物 (如镇痛剂或受体调节剂) 的中间体合成。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域, 具体用途包括:

- 作为关键中间体用于合成靶向 GPCR (G 蛋白偶联受体) 的候选药物
- 用于构建含哌啶环的杂环化合物库, 支持高通量筛选
- 在肽类模拟物设计中作为刚性骨架或手性源
- 作为荧光标记或探针分子的修饰前体

4. 储存条件与使用建议

储存于 -20° C、避光、干燥的惰性气体 (如氮气) 环境中, 有效期 24 个月。开封后建议分装使用以避免反复冻融。使用时需在通风橱中操作, 佩戴防护手套和护目镜。溶解推荐使用无水 DMSO (浓度 ≤ 10 mM), 若需水相体系建议加入少量助溶剂 (如 <1% Tween-80)。注意 Boc 基团在 pH < 4 时易水解, 反应体系需严格控制酸碱度。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC (C18 柱, 乙腈/水梯度洗脱) 检测纯度 $\geq 96\%$, 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。MS 和 ^1H NMR 谱图数据可随 COA 提供。安全数据: 急性毒性 (LD50 大鼠口服) $> 2000 \text{ mg/kg}$, 对皮肤和眼睛有轻微刺激性。操作时避免吸入粉尘, 意外接触需立即用大量清水冲洗。废弃物处置应遵守当地危险化学品管理法规。

(注: 实际应用前请查阅最新版 MSDS 并开展小试验证)