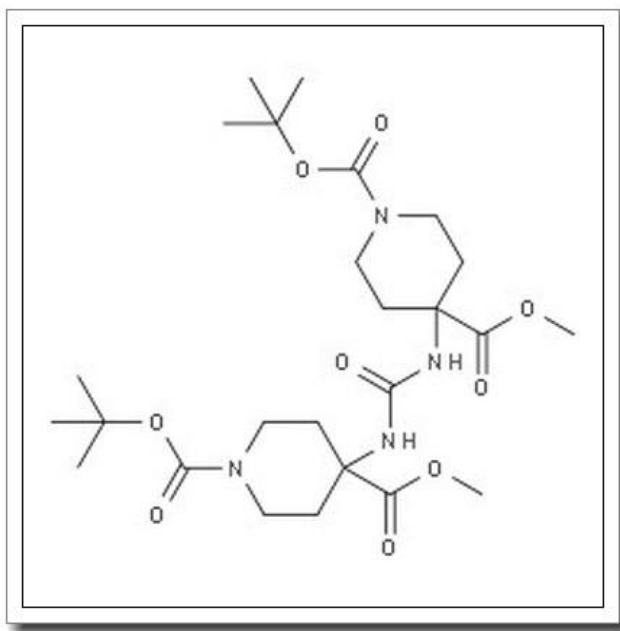


# 1,3-二[N-BOC-4-(甲氧羰基)-4-哌啶基]脲

*1, 3-Di[N-Boc-4-(Methoxycarbonyl)-4-piperidyl]urea*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	1, 3-Di[N-Boc-4-(Methoxycarbonyl)-4-piperidyl]urea
中文名称	1, 3-二[N-BOC-4-(甲氧羰基)-4-哌啶基]脲
CAS 号	1456821-62-7
分子式	C <sub>25</sub> H <sub>42</sub> N <sub>4</sub> O <sub>9</sub>
分子量	542. 622
纯度	>96%

## 产品说明

### 1, 3-二[N-BOC-4-(甲氧羰基)-4-哌啶基]脲产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 1, 3-二[N-BOC-4-(甲氧羰基)-4-哌啶基]脲, CAS 号为 1456821-62-7, 分子式为 C<sub>25</sub>H<sub>42</sub>N<sub>4</sub>O<sub>9</sub>, 分子量为 542. 622。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度经 HPLC 检测确认 ≥96%。其结构中含有 BOC (叔丁氧羰基) 保护基团和甲氧羰基修饰的哌啶环, 赋予其良好的溶解性与稳定性, 可溶于常见有机溶剂如 DMSO、甲醇等, 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, 该化合物在药物化学中具有重要价值。其脲基结构可作为氢键供体/受体参与分子识别, 而 BOC 保护基团能有效避免氨基在合成过程中的副反应。甲氧羰基的引入进一步增强了分子的脂溶性和生物膜穿透能力, 使其成为构建蛋白酶抑制剂或受体调节剂的理想中间体。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于以下领域:

- (1) 医药研发: 作为关键中间体用于合成靶向抗癌、抗炎或神经退行性疾病的小分子药物;
- (2) 化学生物学: 用于构建蛋白质相互作用探针或酶活性位点研究;
- (3) 材料科学: 作为功能单体参与高分子材料的改性。典型应用案例包括 PD-1/PD-L1 抑制剂类药物的结构优化。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在 -20℃ 干燥避光条件下保存, 有效期 24 个月。开封后需充入惰性气体 (如氮气) 密封保存。使用前需平衡至室温以避免结露, 称量应在干燥环境中进行。推荐工作浓度为 1-10 mM (DMSO 配制), 避免反复冻融。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱 (MS) 和核磁共振 (NMR) 验证结构, HPLC 检测显示单一主峰。安全

数据表明: LD50 (大鼠口服) >2000 mg/kg, 但可能对眼睛和呼吸道有轻微刺激性。操作时需佩戴护目镜和防尘口罩, 若接触皮肤应立即用大量清水冲洗。废弃物处理需符合当地有机化学品处置法规。

注: 本说明基于现有研究数据编制, 具体应用需结合实验条件进一步优化。