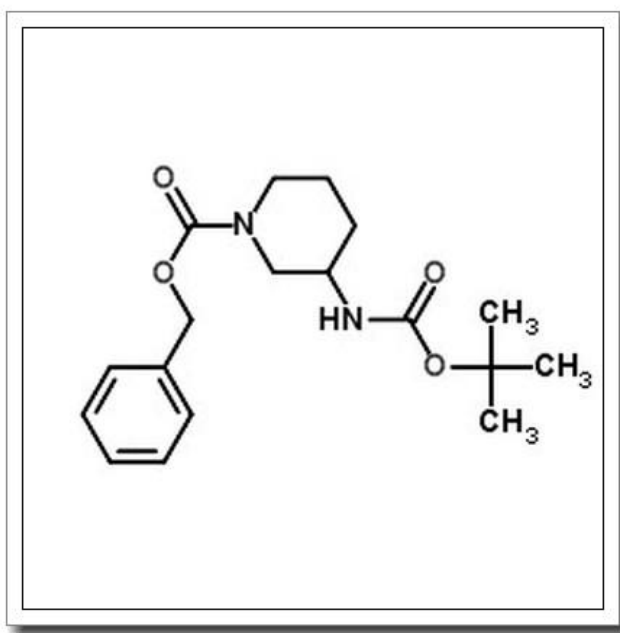


3-(叔丁氧基羰基氨基)哌啶-1-羧酸苄酯

Benzyl 3-(tert-butoxycarbonylamino)-piperidine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Benzyl 3-(tert-butoxycarbonylamino)-piperidine-1-carboxylate
中文名称	3-(叔丁氧基羰基氨基)哌啶-1-羧酸苄酯
CAS 号	406213-47-6
分子式	C ₁₈ H ₂₆ N ₂ O ₄
分子量	334.41
纯度	>96%

产品说明

3-(叔丁氧基羰基氨基)哌啶-1-羧酸苄酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 Benzyl 3-(tert-butoxycarbonylamino)-piperidine-1-carboxylate, CAS 号 406213-47-6, 分子式 C₁₈H₂₆N₂O₄, 分子量 334.41。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 ≥96%, 属于哌啶类衍生物, 具有叔丁氧羰基 (Boc) 和苄酯 (Cbz) 双重保护基团。其结构中的 Boc 基团在酸性条件下易脱除, 而苄酯基团可通过氢化还原裂解, 这一特性使其成为多肽合成和药物中间体制备中的关键砌块。

2. 生物化学功能与重要性

作为氨基保护的双功能分子, 本产品在有机合成中能有效保护哌啶环上的氨基, 避免副反应发生。Boc 基团的引入可增强中间体的稳定性, 而苄酯基团则为后续羧基活化提供位点。其在构建生物活性分子 (如蛋白酶抑制剂、神经递质类似物) 时表现出高选择性, 是药物研发中不可或缺的合成子。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于医药和生化研究领域:

- 作为抗病毒药物 (如 HIV 蛋白酶抑制剂) 的中间体
- 用于合成镇痛类或抗抑郁类药物的哌啶结构单元
- 在固相多肽合成中作为保护氨基酸的载体
- 催化不对称合成中的手性辅助剂

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20℃ 下避光保存, 干燥惰性气体 (如氩气) 环境中密封存放。开封后需充氮保护, 避免反复冻融。使用时应在通风橱中操作, 溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、DMF 等有机溶剂, 水溶性差。建议反应体系保持无水条件, Boc 脱保护可使用三氟乙酸/二氯甲烷 (1:1) 体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，残留溶剂符合 ICH 标准。MSDS 数据显示其具有刺激性，操作时需佩戴防护手套及护目镜。急性毒性数据（LD50 大鼠口服） > 2000 mg/kg，属于低毒类化合物，但接触后应立即用大量清水冲洗。废弃物处置需符合危险化学品管理条例。

注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验方案调整。更多技术参数可索取 COA 报告。