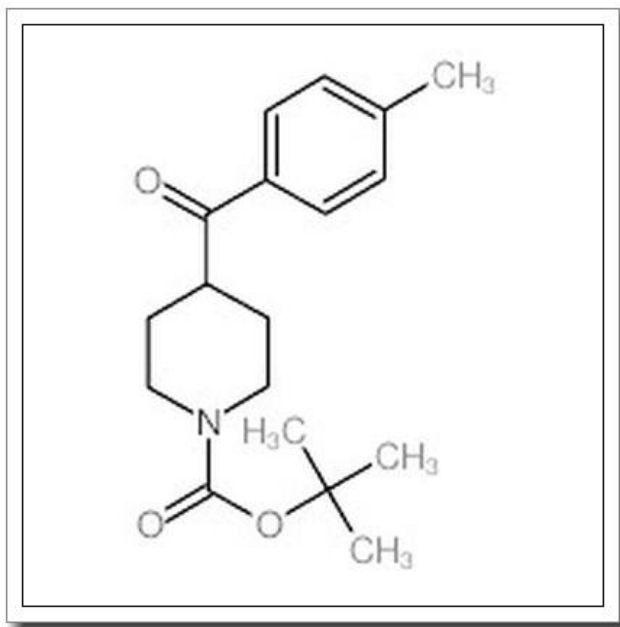


4-(4-甲基苯甲酰基)哌啶-1-羧酸叔丁酯

tert-Butyl 4-(4-methylbenzoyl)piperidine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	<i>tert-Butyl 4-(4-methylbenzoyl)piperidine-1-carboxylate</i>
中文名称	4-(4-甲基苯甲酰基)哌啶-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	912768-78-6
分子式	C ₁₈ H ₂₅ N ₀₃
分子量	303.396
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

4-(4-甲基苯甲酰基)哌啶-1-羧酸叔丁酯 (tert-Butyl 4-(4-methylbenzoyl)piperidine-1-carboxylate) 是一种有机化合物, CAS 号为 912768-78-6, 分子式为 C₁₈H₂₅N₁O₃, 分子量为 303.396。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 纯度通常高于 96%。其结构包含哌啶环和叔丁氧羰基 (Boc) 保护基, 以及 4-甲基苯甲酰基团, 具有较高的化学稳定性和溶解性, 适用于多种有机合成反应。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物在药物化学和生物化学研究中具有重要作用。哌啶环和 Boc 保护基的存在使其成为合成复杂生物活性分子的关键中间体, 尤其在神经科学和药物开发领域。其结构中的 4-甲基苯甲酰基团可进一步衍生化, 用于构建具有特定药理活性的化合物, 如激酶抑制剂或受体调节剂。

3. 主要应用领域与具体用途

4-(4-甲基苯甲酰基)哌啶-1-羧酸叔丁酯广泛应用于医药研发和有机合成领域。具体用途包括: 作为药物中间体用于合成抗肿瘤、抗炎或中枢神经系统药物; 在组合化学中用于构建多样性分子库; 在 PROTAC (蛋白降解靶向嵌合体) 技术中作为连接子或配体组成部分。

4. 储存条件与使用建议

该产品需密封保存于干燥、阴凉的环境中, 建议储存温度为 2-8° C, 避免光照和潮湿。使用时应在惰性气体 (如氮气) 保护下操作, 以防止氧化或降解。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二氯甲烷、DMF 等有机溶剂, 可根据实验需求选择合适的溶剂体系。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱分析确保纯度 >96%。使用时需佩戴防护手套、护目镜和实验服, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。如不慎接触, 应立即用大量清水冲洗并

就医。废弃物应按照当地法规处理，避免对环境造成污染。安全数据表（SDS）可提供更详细的毒理学和应急处理信息。