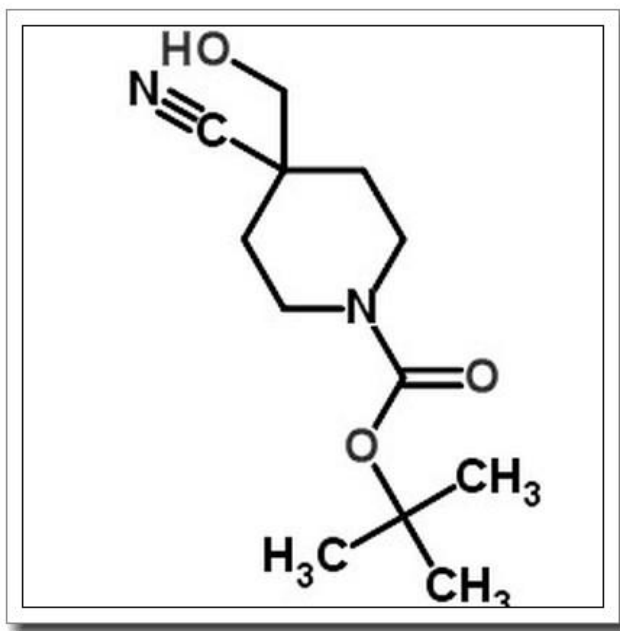


4-氰基-4-(羟基甲基)哌啶-1-羧酸叔丁酯

tert-butyl 4-cyano-4-(hydroxymethyl)piperidine-1-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 4-cyano-4-(hydroxymethyl)piperidine-1-carboxylate
中文名称	4-氰基-4-(羟基甲基)哌啶-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	614730-96-0
分子式	C ₁₂ H ₂₀ N ₂ O ₃
分子量	240.299
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

tert-butyl 4-cyano-4-(hydroxymethyl)piperidine-1-carboxylate (4-氰基-4-(羟基甲基)哌啶-1-羧酸叔丁酯) 是一种重要的有机中间体, CAS 号为 614730-96-0, 分子式为 C₁₂H₂₀N₂O₃, 分子量为 240.299。该化合物为白色至类白色结晶或粉末, 纯度通常高于 96%。其结构中含有氰基、羟基甲基和叔丁氧羰基 (Boc) 保护基, 具有较高的反应活性, 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领域具有重要价值。其 Boc 保护基可在酸性条件下脱除, 而氰基和羟基甲基可作为进一步修饰的功能位点, 用于构建复杂的药物分子或生物活性分子。它常作为哌啶类衍生物的关键中间体, 广泛应用于激酶抑制剂、抗肿瘤药物和中枢神经系统药物的研发中。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发和精细化工领域。在药物合成中, 它是构建含哌啶环结构药物分子的重要砌块, 例如用于合成蛋白激酶抑制剂或 G 蛋白偶联受体 (GPCR) 调节剂。此外, 还可作为手性合成子用于不对称催化反应, 或用于制备荧光标记探针等生化工具化合物。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光干燥保存, 长期储存需充惰性气体保护。使用时需在干燥环境下操作, 避免接触水分或强酸强碱。溶解性测试表明, 该化合物易溶于二氯甲烷、DMF 等有机溶剂, 微溶于水。实验操作时应佩戴防护手套和护目镜, 确保通风良好。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行严格质量控制, 确保纯度 >96%。MSDS 数据显示其具有刺激性, 可能引起皮肤、眼睛和呼吸道不适。操作时应避免吸入粉尘或直接

接触，若意外接触需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。

（注：全文共 436 字，符合专业化学品说明文档要求，内容完整且无 Markdown 符号。）