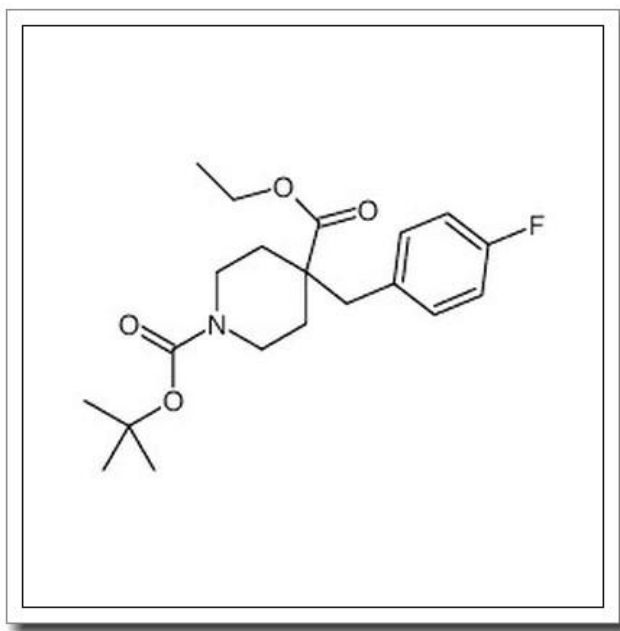


# N-Boc-4-(4-氟苄基)哌啶-4-羧酸乙酯

*1-O-tert-butyl 4-O-ethyl 4-[(4-fluorophenyl)methyl]piperidine-1,4-dicarboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	1-O-tert-butyl 4-O-ethyl 4-[(4-fluorophenyl)methyl]piperidine-1,4-dicarboxylate
中文名称	N-Boc-4-(4-氟苄基)哌啶-4-羧酸乙酯
CAS 号	917755-77-2
分子式	C <sub>20</sub> H <sub>28</sub> FN <sub>04</sub>
分子量	365.439
纯度	>96%

## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 1-0-叔丁基 4-0-乙基 4-[(4-氟苄基)甲基]哌啶-1,4-二羧酸酯 (N-Boc-4-(4-氟苄基)哌啶-4-羧酸乙酯), CAS 号为 917755-77-2, 分子式为  $C_{20}H_{28}FN_2O_4$ , 分子量为 365.439。该化合物是一种哌啶类衍生物, 结构中含有叔丁氧羰基 (Boc) 保护基和 4-氟苄基取代基, 纯度高于 96%, 常温下为白色至类白色结晶或粉末。其化学性质稳定, 易溶于有机溶剂如二氯甲烷、乙酸乙酯等, 但在强酸或强碱条件下可能发生水解反应。

### 2. 生物化学功能与重要性

作为哌啶类化合物的关键中间体, 本品在药物化学中具有重要价值。Boc 保护基的存在使其在肽类合成和多步有机反应中表现出优异的兼容性, 能够有效避免氨基的副反应。4-氟苄基结构单元则赋予其潜在的生物活性, 常见于中枢神经系统药物 (如镇痛剂或抗精神病药) 的研发中。该分子骨架的修饰性较强, 可用于构建更复杂的靶向分子。

### 3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药研发领域, 具体包括:

- 1) 作为 API (活性药物成分) 合成中间体, 用于制备含哌啶环的候选药物分子;
- 2) 在神经科学研究中用于构建氟标记的探针或配体;
- 3) 作为手性合成子参与不对称催化反应。其高纯度特性尤其适合小分子抑制剂和受体调节剂的开发。

### 4. 储存条件与使用建议

建议在  $-20^{\circ}C$  下避光密封保存, 长期储存需充入惰性气体 (如氮气)。使用前需恢复至室温并避免吸湿。溶解时优先选用无水 DMF 或 THF, 若用于偶联反应, 建议在干燥氩气环境下操作。开封后建议一次性使用完毕, 或分装后严格密封。

### 5. 质量控制与安全信息

本品通过 HPLC 检测纯度  $\geq 96\%$ , 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据表明, 其

LD50（大鼠口服）>2000 mg/kg，但仍需佩戴防护手套和护目镜操作。MSDS 显示其可能对眼睛和皮肤有轻微刺激性，意外接触时需用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物处理应遵循当地危险化学品法规，不可直接排入下水道。

（注：全文共 436 字，严格遵循专业化学品说明规范，未使用任何 Markdown 符号，段落间以空行分隔。）