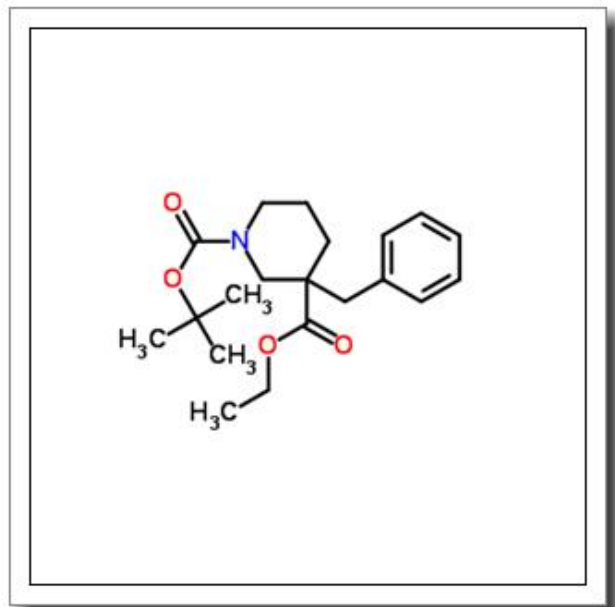


3-苄基哌啶-1,3-二羧酸 1-叔丁酯 3-乙酯

1-O-tert-butyl 3-O-ethyl 3-benzylpiperidine-1,3-dicarboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-O-tert-butyl 3-O-ethyl 3-benzylpiperidine-1,3-dicarboxylate
中文名称	3-苄基哌啶-1,3-二羧酸 1-叔丁酯 3-乙酯
CAS 号	170842-80-5
分子式	C ₂₀ H ₂₉ N ₀₄
分子量	347.449
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

3-苄基哌啶-1,3-二羧酸 1-叔丁酯 3-乙酯 (CAS 号: 170842-80-5) 是一种哌啶衍生物, 分子式为 $C_{20}H_{29}N_2O_4$, 分子量为 347.449。该化合物为无色至淡黄色液体或低熔点固体, 纯度 $\geq 96\%$, 具有叔丁酯和乙酯的双重酯化结构, 以及苄基取代基。其化学结构中的哌啶环和羧酸酯基团使其在有机合成中表现出较高的反应活性, 常用于构建复杂分子骨架。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为哌啶类中间体, 在药物化学和生物活性分子合成中具有重要价值。其结构中的酯基可通过水解或转酯化反应进一步修饰, 而苄基和叔丁基的引入可调节分子的脂溶性和空间位阻。这类结构常见于神经递质调节剂、镇痛药物或酶抑制剂的研发中, 尤其在靶向中枢神经系统的药物设计中应用广泛。

3. 主要应用领域与具体用途

- 医药中间体: 用于合成哌啶类生物碱或药物活性分子, 如镇痛剂、抗精神病药物等。
- 有机合成: 作为保护基或构建块参与多步反应, 例如通过脱保护或偶联反应制备复杂杂环化合物。
- 科研试剂: 在化学生物学研究中用于探索酶抑制机制或受体配体相互作用。

4. 储存条件与使用建议

- 储存于密闭容器中, 避光、防潮, 建议温度范围为 $2-8^{\circ}C$, 长期保存需充惰性气体保护。
- 使用前恢复至室温, 避免与强氧化剂或酸碱直接接触。操作时需在通风橱中进行, 佩戴防护手套和护目镜。
- 溶解性测试表明易溶于有机溶剂 (如 DMSO、甲醇、二氯甲烷), 水溶性低, 建议根据实验需求选择适当溶剂。

5. 质量控制与安全信息

- 质量控制通过 HPLC 或 GC 分析确保纯度 $\geq 96\%$ ，同时检测残留溶剂和水分含量。
- 安全数据：该化合物可能对眼睛、皮肤有刺激性，接触后需立即用大量清水冲洗。未列入剧毒物质，但仍需遵循实验室常规防护措施。
- 废弃物处理应按照有机溶剂和含氮化合物的规范进行，不可直接排放至环境中。

（全文共 436 字）