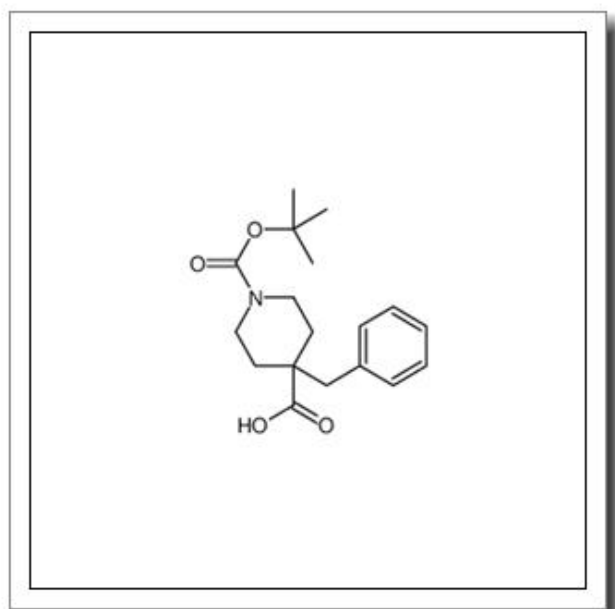


(3S)-3-苯基甲基-1,3-哌啶二羧酸-1-(1,1-二甲基乙基)酯

4-benzyl-1-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]piperidine-4-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-benzyl-1-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]piperidine-4-carboxylic acid
中文名称	(3S)-3-苯基甲基-1,3-哌啶二羧酸-1-(1,1-二甲基乙基)酯
CAS 号	170838-87-6
分子式	C ₁₈ H ₂₅ N ₁ O ₄
分子量	319.395
纯度	≥96%

产品说明

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 4-benzyl-1-[(2-methylpropan-2-yl)oxycarbonyl]piperidine-4-carboxylic acid, 中文名称为(3S)-3-苯基甲基-1,3-哌啶二羧酸-1-(1,1-二甲基乙基)酯, CAS 号为 170838-87-6。其分子式为 C₁₈H₂₅N₀₄, 分子量为 319.395, 纯度 ≥96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 具有特定的哌啶环结构, 苯基甲基和叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团为其关键功能位点, 使其在有机合成和药物化学中具有重要应用价值。

2. 生物化学功能与重要性

本产品是一种重要的医药中间体, 其哌啶环结构广泛存在于多种生物活性分子中。Boc 保护基团的存在使其在肽类合成和药物设计中具有较高的稳定性, 便于后续脱保护或进一步修饰。苯基甲基的引入可增强化合物的疏水性, 影响其与靶标蛋白的相互作用, 因此在药物研发中常用于优化药代动力学性质。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物主要用于药物化学和有机合成领域, 具体用途包括:

- 作为关键中间体用于合成具有哌啶结构的药物分子, 如镇痛剂、抗精神病药物和抗炎药物。
- 在肽类合成中作为保护基团载体, 用于构建复杂多肽或蛋白质类似物。
- 用于研究酶抑制剂或受体调节剂的构效关系, 帮助优化先导化合物的活性。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于干燥、避光的环境中, 储存温度为 2-8° C, 以保持其稳定性。开封后需密封保存, 避免吸湿或氧化。使用时应在惰性气体 (如氮气) 保护下操作, 尤其是进行敏感反应时。溶解性测试表明, 本品易溶于有机溶剂如二甲基亚砜 (DMSO) 和甲醇, 但在水中溶解度较低。

5. 质量控制与安全信息

本品经过严格的质量控制，纯度通过高效液相色谱（HPLC）验证，确保 $\geq 96\%$ 。使用时应穿戴适当的个人防护装备，包括实验服、手套和护目镜。避免吸入粉尘或接触皮肤，如不慎接触，需立即用大量清水冲洗并就医。本产品仅供科研用途，不可用于人体或动物实验。废弃物处理需遵循当地化学品处置法规。