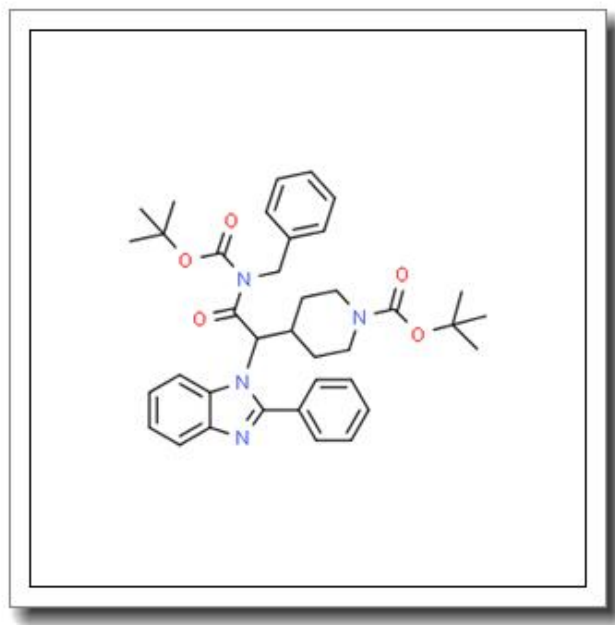


4-(2-(苄基(叔丁氧基羰基)氨基)-2-氧代-1-(2-苯基-1H-苯并[D]咪唑-1-基)乙基

1-Piperidinecarboxylic acid, 4-[2-[[[(1,1-diMethylethoxy)carbonyl](phenylMethyl)amino]-2-oxo-1-(2-phenyl-1H-benziMidazol-1-yl)ethyl]-, 1,1-diMethylethyl ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-Piperidinecarboxylic acid, 4-[2-[[[(1,1-diMethylethoxy)carbonyl](phenylMethyl)amino]-2-oxo-1-(2-phenyl-1H-benziMidazol-1-yl)ethyl]-, 1,1-diMethylethyl ester
中文名称	4-(2-(苄基(叔丁氧基羰基)氨基)-2-氧代-1-(2-苯基-1H-苯并[D]咪唑-1-基)乙基
CAS 号	1440753-63-8
分子式	C37H44N4O5
分子量	624.77

纯度	$\geq 96\%$
----	-------------

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为 1-哌啶甲酸衍生物，化学名称为 4-[2-[[(1, 1-二甲基乙氧基) 羰基] (苯甲基) 氨基]-2-氧代-1-(2-苯基-1H-苯并咪唑-1-基) 乙基]-1, 1-二甲基乙酯，CAS 号 1440753-63-8，分子式 C₃₇H₄₄N₄O₅，分子量 624.77。该化合物为白色至类白色结晶性粉末，纯度 ≥96%，具有高度特异性结构，其苯并咪唑基团与叔丁氧羰基保护氨基的协同作用使其在有机合成中表现出独特反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

该分子通过苯并咪唑环的氮原子配位能力及羧酸酯基的可修饰性，可作为蛋白酶抑制剂或受体拮抗剂的关键中间体。其叔丁氧羰基 (Boc) 保护基团在酸性条件下易脱除，适用于固相多肽合成 (SPPS) 中的片段缩合反应。在药物研发中，该结构常用于构建靶向肿瘤或炎症通路的小分子化合物库。

3. 主要应用领域与具体用途

作为高端医药中间体，主要用于以下领域：

- (1) 抗肿瘤药物开发：作为激酶抑制剂的核心骨架，如 EGFR 或 VEGFR 抑制剂的前体
- (2) 神经科学研究：通过结构修饰可生成 G 蛋白偶联受体 (GPCR) 调节剂
- (3) 诊断试剂合成：标记荧光基团后用于细胞凋亡检测探针
- (4) 材料化学：作为有机金属框架 (MOF) 的配体组分

4. 储存条件与使用建议

储存于 -20°C 惰性气体 (如氩气) 保护的密闭容器中，避免光照与湿度。开封后建议分装使用，剩余物料需充氮密封。溶解时优先选用无水 DMF 或 DMSO，工作浓度建议 ≤10 mM。实验操作应在通风橱中进行，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度 ≥96%，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。MS 与 NMR 谱图提供结构确证依据。该化合物属于刺激性化学品，CAS 编号 1440753-63-8 已列入 REACH 预

注册清单。操作时需佩戴护目镜与丁腈手套，若接触眼睛应立即用大量生理盐水冲洗并就医。废弃物处置需遵循当地危险化学品管理法规。