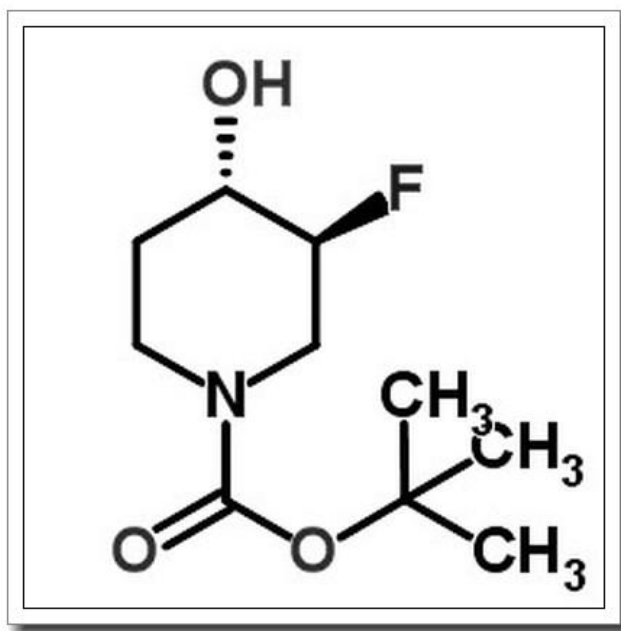


1-Piperidinecarboxylic acid, 3-fluoro-4-hydroxy-, 1,1-dimethylethyl ester, (3R,4R)-rel

1-Piperidinecarboxylic acid, 3-fluoro-4-hydroxy-, 1,1-dimethylethyl ester, (3R, 4R)-rel



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-Piperidinecarboxylic acid, 3-fluoro-4-hydroxy-, 1,1-dimethylethyl ester, (3R, 4R)-rel
中文名称	1-哌啶羧酸, 3-氟-4-羟基-, 1,1-二甲基乙基酯, (3R, 4R)-rel
CAS 号	955029-44-4
分子式	C ₁₀ H ₁₈ FN ₃ O
分子量	219.253
纯度	>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 (3R, 4R)-rel-3-氟-4-羟基-1-哌啶甲酸叔丁酯，CAS 号为 955029-44-4，分子式为 C₁₀H₁₈FN₃O₃，分子量为 219.253。其纯度经高效液相色谱（HPLC）分析确认大于 96%，为白色至类白色结晶或粉末状固体。该化合物含有一个手性中心，以 (3R, 4R)-相对构型存在，氟原子和羟基的引入使其具有独特的反应活性，适用于不对称合成及药物中间体制备。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌啶环结构的修饰物，本品在生物化学中常作为酶抑制剂或受体配体的关键结构单元。氟原子的电负性和羟基的氢键形成能力可显著影响分子与靶标蛋白的相互作用，在药物设计中用于优化代谢稳定性和生物利用度。其叔丁酯基团提供保护作用，便于后续选择性脱保护或进一步官能团化。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药研发领域，尤其作为合成抗感染药物、中枢神经系统药物及抗肿瘤化合物的中间体。具体用途包括：

- 用于构建含氟哌啶结构的活性分子库
- 作为手性砌块参与多步有机合成
- 在蛋白酶抑制剂设计中作为核心骨架

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20° C 下避光密封保存，长期储存需充惰性气体保护。使用时需在干燥环境中操作，避免接触水分。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、DMF 等有机溶剂，微溶于水。建议使用前进行氮气保护下的活化处理以提高反应效率。

5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱（MS）和核磁共振（NMR）验证结构，批次间一致性严格控制。安全数据表明其具有刺激性，操作时应佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。若不慎接触

皮肤，需立即用大量清水冲洗。废弃物处理需符合有机氟化合物处置规范，避免直接排放至环境中。

（注：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合用户自身实验条件验证。）