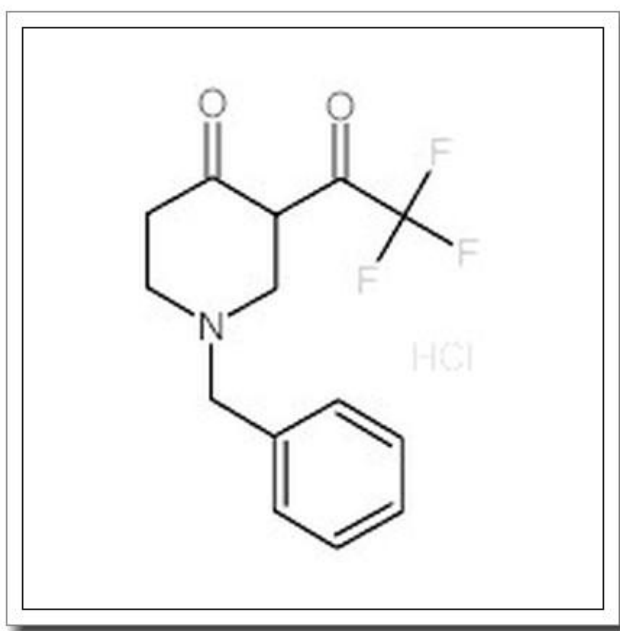


1-苄基-3-(2,2,2-三氟乙酰基)哌啶-4-酮 盐酸盐

1-benzyl-3-(2,2,2-trifluoroacetyl)piperidin-4-one, hydrochloride



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-benzyl-3-(2,2,2-trifluoroacetyl)piperidin-4-one, hydrochloride
中文名称	1-苄基-3-(2,2,2-三氟乙酰基)哌啶-4-酮盐酸盐
CAS 号	1198285-40-3
分子式	C ₁₄ H ₁₅ ClF ₃ N ₂ O ₂
分子量	321.723
纯度	>96%

产品说明

1-苄基-3-(2, 2, 2-三氟乙酰基)哌啶-4-酮盐酸盐产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 1-benzyl-3-(2, 2, 2-trifluoroacetyl)piperidin-4-one, hydrochloride，分子式 C₁₄H₁₅ClF₃N₂O₂，分子量 321.723，CAS 号 1198285-40-3。其结构中含苄基、三氟乙酰基及哌啶酮骨架，赋予其独特的亲脂性和反应活性。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，易溶于极性有机溶剂如甲醇、DMSO，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌啶酮类衍生物，该化合物可通过三氟乙酰基的强吸电子效应调节哌啶环的电子分布，在药物化学中常作为关键中间体。其结构特征使其能够参与亲核取代、缩合等反应，尤其适用于构建含氮杂环的活性分子，在神经药理学和酶抑制剂开发中具有潜在价值。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于以下领域：

- (1) 医药研发：作为激酶抑制剂或 GPCR 配体的合成前体，用于抗肿瘤、抗炎药物开发。
- (2) 农药化学：修饰后可作为杀虫剂或杀菌剂的活性组分。
- (3) 学术研究：用于有机合成方法学开发及结构-活性关系（SAR）研究。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于-20℃干燥环境中，避免光照及湿度波动。开封后需充惰性气体保护。使用时需在通风橱中操作，佩戴防护手套及护目镜。溶解推荐使用无水 DMSO，配制后溶液建议现配现用，长期储存可能导致降解。

5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱（MS）、核磁（NMR）及 HPLC 三重验证，符合国际化学品标准。安全数据表明其对皮肤和眼睛有刺激性（GHS 分类：Category 2），操作时应避免吸入

粉尘。如接触皮肤，立即用大量清水冲洗。废弃物处置需符合当地危险化学品管理法规。

注：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需结合用户实验体系进一步优化。