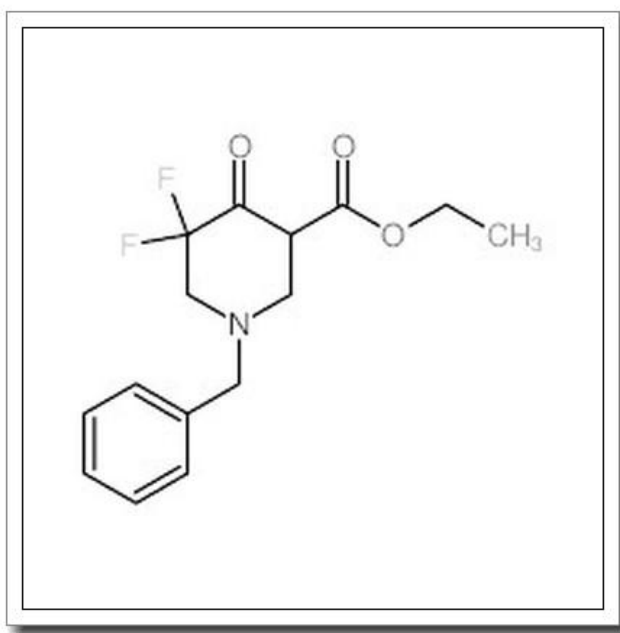


1-苄基-5,5-二氟-4-氧代哌啶-3-羧酸乙酯

ethyl 1-benzyl-5,5-difluoro-4-oxopiperidine-3-carboxylate



产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 1-benzyl-5,5-difluoro-4-oxopiperidine-3-carboxylate
中文名称	1-苄基-5,5-二氟-4-氧代哌啶-3-羧酸乙酯
CAS 号	1067915-34-7
分子式	C ₁₅ H ₁₇ F ₂ N ₁ O ₃
分子量	297.297
纯度	>96%

产品说明

1-苄基-5,5-二氟-4-氧代哌啶-3-羧酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 ethyl 1-benzyl-5,5-difluoro-4-oxopiperidine-3-carboxylate，是一种含氟哌啶衍生物，CAS 号为 1067915-34-7。其分子式为 C₁₅H₁₇F₂N₃O₃，分子量 297.297，外观通常为白色至类白色结晶或粉末，纯度 ≥96%。结构中包含哌啶酮骨架、苄基保护基及二氟取代基，赋予其独特的立体电子效应和反应活性，适合作为有机合成中间体或药物分子砌块。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物通过哌啶环上的氟原子和羰基官能团参与氢键形成及亲电反应，在药物化学中常用于构建具有生物活性的含氮杂环结构。二氟取代可增强代谢稳定性和膜穿透性，使其在蛋白酶抑制剂或神经递质调节剂开发中具有潜在价值。

3. 主要应用领域与具体用途

作为关键中间体，广泛应用于抗病毒药物、抗肿瘤先导化合物及中枢神经系统药物的研发。具体用于：1) 含氟哌啶类化合物的结构修饰；2) 通过酯水解或胺化反应衍生化；3) 作为荧光标记物或生物探针的合成前体。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 -20℃ 至 4℃ 干燥环境中，避免光照及湿气。开封后需充惰气保护。使用时应佩戴防护手套及护目镜，在通风橱中操作。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、DMF 等有机溶剂，水溶性较差。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC、NMR 及质谱进行批次纯度验证，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明该物质可能引起眼睛和皮肤刺激，操作时需参照 MSDS 规范。废弃物处置应遵守当地危险化学品管理条例。

注：本产品仅限科研用途，不可用于人体或食品相关领域。具体应用需进一步实验验证其适用性。