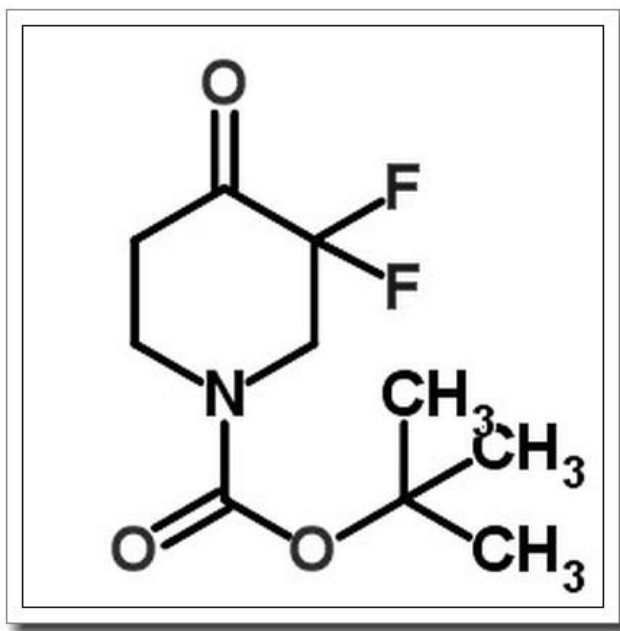


# 3,3-二氟-4-氧代哌啶-1-羧酸叔丁酯 水合物

*tert-butyl 3,3-difluoro-4-oxopiperidine-1-carboxylate*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 3,3-difluoro-4-oxopiperidine-1-carboxylate
中文名称	3,3-二氟-4-氧代哌啶-1-羧酸叔丁酯水合物
CAS 号	1215071-17-2
分子式	C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> F <sub>2</sub> N <sub>1</sub> O <sub>3</sub>
分子量	235.228
纯度	>96%

## 产品说明

### 3, 3-二氟-4-氧代哌啶-1-羧酸叔丁酯水合物产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

3, 3-二氟-4-氧代哌啶-1-羧酸叔丁酯水合物（化学名称：tert-butyl 3, 3-difluoro-4-oxopiperidine-1-carboxylate hydrate）是一种重要的含氟哌啶衍生物，CAS 号为 1215071-17-2，分子式为 C<sub>10</sub>H<sub>15</sub>F<sub>2</sub>N<sub>3</sub>O<sub>3</sub>，分子量为 235.228。该化合物为白色至类白色结晶性粉末，纯度高于 96%，具有典型的羧酸叔丁酯结构特征，其 3, 3 位二氟取代和 4 位羰基赋予其独特的反应活性。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为哌啶酮类化合物的氟化衍生物，该产品在有机合成中可作为关键中间体，其结构中的氟原子能显著改变分子的电子分布和代谢稳定性。二氟取代的哌啶骨架在药物化学中广泛用于调节化合物的脂溶性、生物利用度及靶标结合能力，尤其在神经递质调节剂和酶抑制剂设计中具有重要价值。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要用于医药研发和精细化工领域，具体包括：

1. 作为抗肿瘤、抗病毒或中枢神经系统药物合成的中间体；
2. 用于构建含氟杂环化合物库，支持高通量药物筛选；
3. 在不对称催化反应中作为手性配体的前体；
4. 应用于放射性标记化合物的合成研究。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在-20° C、干燥避光条件下密封保存，开封后需充惰性气体保护以防降解。使用时需在干燥环境中操作，避免与强氧化剂或强酸接触。溶解性测试表明其易溶于二氯甲烷、THF 等有机溶剂，水溶性较低，建议预先溶解于极性有机溶剂后再参与反应。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度≥96%，残留溶剂符合 ICH 标准。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。若接触皮肤，需立即用大量清水冲洗。废弃物处理需遵守当地化学品管理法规，建议通过专业危废机构处置。

（注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件进一步验证。）