

4-Benzyl-3,3-difluoropiperidine hydrochloride (1:1)

4-Benzyl-3,3-difluoropiperidine hydrochloride (1:1)



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-Benzyl-3,3-difluoropiperidine hydrochloride (1:1)
中文名称	4-Benzyl-3,3-difluoropiperidine hydrochloride (1:1)
CAS 号	1334415-44-9
分子式	C ₁₂ H ₁₆ ClF ₂ N
分子量	247.712
纯度	>96%

产品说明

4-苄基-3,3-二氟哌啶盐酸盐(1:1)产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 4-Benzyl-3,3-difluoropiperidine hydrochloride (1:1), CAS 号 1334415-44-9, 分子式 C₁₂H₁₆ClF₂N, 分子量 247.712, 是一种含氟哌啶衍生物的盐酸盐形式。外观为白色至类白色结晶性粉末, 纯度经 HPLC 测定大于 96%。其结构中的二氟代哌啶环与苄基官能团赋予分子独特立体电子效应, 盐酸盐形式增强了水溶性与稳定性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为含氟哌啶类生物碱类似物, 可通过哌啶环的碱性氮原子与生物靶标相互作用。二氟取代显著影响分子构象和脂溶性, 使其在跨膜传输和靶点结合中表现优异。在药物化学领域, 此类结构常作为药效团用于调节中枢神经系统活性, 或作为合成中间体构建更复杂分子。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发与有机合成领域:

- 作为关键中间体用于神经递质调节剂或 G 蛋白偶联受体 (GPCR) 配体的合成
- 用于氟代生物碱类化合物的结构修饰与构效关系研究
- 在 PET 显影剂开发中作为含氟前体化合物
- 作为手性催化剂或配体的合成砌块

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 置于-20℃干燥避光环境, 长期保存建议充氮保护。使用时需在干燥惰性气体环境下操作, 避免接触水分。溶解推荐使用无水乙醇或 DMF, 水溶液需现配现用。开封后建议一次性使用完毕。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 和质谱多重验证, 符合研究级标准。安全数据:

- 危害标识: 刺激性 (H315-H319), 吞咽有害 (H302)

- 防护措施: 佩戴防护手套/眼镜, 在通风橱中操作
 - 急救措施: 皮肤接触时用大量清水冲洗, 误食需立即就医
- 运输分类: 非危险品, 但建议按一般化学品规范运输

注: 本产品仅限科研用途, 不适用于药物、食品或家庭用途。使用者应具备专业化学品操作知识。