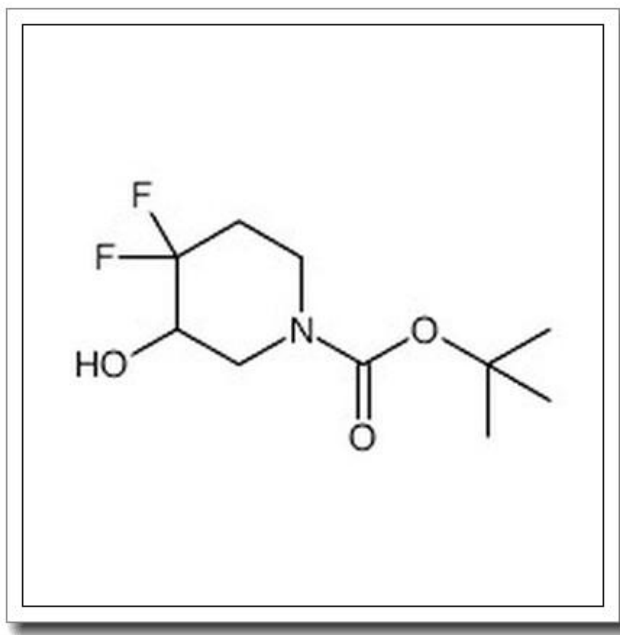


# 4,4-二氟-3-羟基哌啶-1-羧酸叔丁酯

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



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	tert-butyl 4,4-difluoro-3-hydroxypiperidine-1-carboxylate
中文名称	4,4-二氟-3-羟基哌啶-1-羧酸叔丁酯
CAS 号	1186688-52-7
分子式	C <sub>10</sub> H <sub>17</sub> F <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>
分子量	237.244
纯度	>96%

## 产品说明

### 4, 4-二氟-3-羟基哌啶-1-羧酸叔丁酯产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

4, 4-二氟-3-羟基哌啶-1-羧酸叔丁酯 (CAS 号: 1186688-52-7) 是一种含氟哌啶衍生物, 分子式为  $C_{10}H_{17}F_2N_3O_3$ , 分子量 237. 244。该化合物以白色至类白色结晶粉末形式存在, 纯度高于 96%, 具有显著的立体位阻效应和极性特征。其结构中的叔丁氧羰基 (Boc) 保护基和羟基官能团使其成为有机合成中重要的中间体, 而 4, 4 位二氟取代则赋予其独特的电子效应和代谢稳定性。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为哌啶环修饰化合物, 该产品在药物化学中常用于构建活性分子骨架。羟基和二氟甲基的协同作用可调节化合物的脂溶性、氢键结合能力及生物膜穿透性, 尤其适用于中枢神经系统药物设计。其 Boc 保护基在酸性条件下可选择性脱除, 为后续官能团化提供灵活反应位点, 在蛋白酶抑制剂、激酶调节剂等靶点开发中具有关键价值。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品主要应用于创新药研发领域, 具体包括:

- 作为含氟生物电子等排体, 用于优化先导化合物的代谢稳定性和靶标亲和力
- 合成抗肿瘤、抗感染及神经退行性疾病治疗药物的核心片段
- 在 PET 示踪剂开发中作为放射性标记前体
- 用于手性催化剂配体的结构修饰

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在  $-20^{\circ}C$  惰性气体 (如氩气) 环境下避光保存, 开封后需充氮密封。使用前需恢复至室温以避免结霜, 称量应在干燥环境中进行。溶解性测试表明其在 DMSO、二氯甲烷中溶解度良好 ( $>50\text{ mg/mL}$ ), 水溶液中需超声辅助分散。实验操作建议佩戴防毒面具及丁腈手套, 反应体系中避免强还原剂直接接触。

## 5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC (UV 254 nm) 检测纯度  $\geq 96\%$ , 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。MS 和 NMR 谱图提供结构确证数据。该化合物对眼睛和呼吸道有轻微刺激性 (GHS 分类: Warning), 操作时应配备应急冲洗装置。废弃物处置需遵循当地危险化学品管理条例, 不可直接排入下水系统。详细安全数据参见随货 MSDS 文件。

(注: 本说明基于现有研究数据编制, 实际应用需结合具体实验条件验证。)