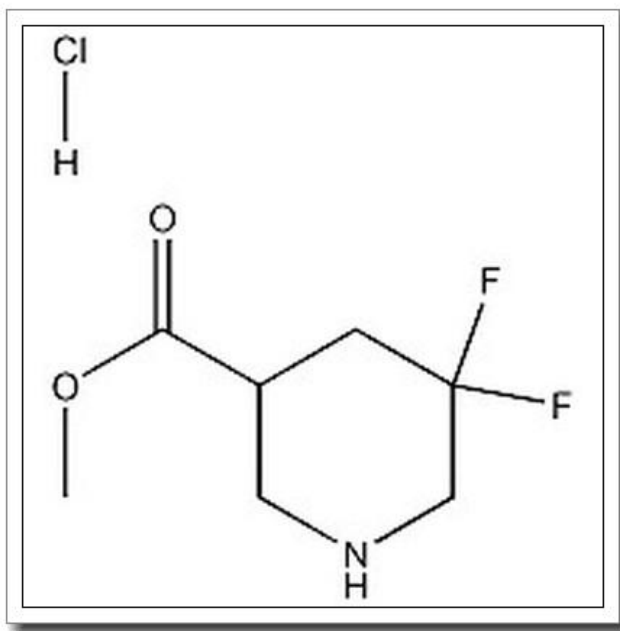


Methyl 5,5-difluoro-3-piperidinecarboxylate hydrochloride

Methyl 5,5-difluoro-3-piperidinecarboxylate hydrochloride



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 5,5-difluoro-3-piperidinecarboxylate hydrochloride
中文名称	Methyl 5,5-difluoro-3-piperidinecarboxylate hydrochloride
CAS 号	1359656-87-3
分子式	C7H12ClF2N02
分子量	215.6254864
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

Methyl 5,5-difluoro-3-piperidinecarboxylate hydrochloride (CAS 号: 1359656-87-3) 是一种有机氟化合物, 分子式为 $C_7H_{12}ClF_2NO_2$, 分子量为 215.6254864。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度高于 96%, 具有稳定的化学性质。其结构中的 5,5-二氟哌啶环和甲酯基团使其在有机合成和药物化学中具有独特的反应活性。盐酸盐形式提高了其水溶性和储存稳定性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为哌啶类衍生物, 其分子中的氟原子赋予其特殊的电子效应和代谢稳定性, 常用于药物分子设计中的结构修饰。二氟取代的哌啶环能够增强化合物的脂溶性和生物膜穿透能力, 因此在生物活性分子的开发中具有重要价值。此外, 其甲酯基团可作为羧酸前体, 便于进一步衍生化反应。

3. 主要应用领域与具体用途

Methyl 5,5-difluoro-3-piperidinecarboxylate hydrochloride 广泛应用于医药中间体合成, 特别是在抗肿瘤、抗病毒及中枢神经系统药物的研发中。具体用途包括:

- 作为关键片段用于构建含氟哌啶结构的候选药物分子。
- 在组合化学中用于高通量筛选和结构优化。
- 作为手性合成子, 用于不对称催化反应。

4. 储存条件与使用建议

该产品需在干燥、避光条件下储存, 推荐温度为 2-8° C, 长期保存建议置于惰性气体环境中。使用前需恢复至室温并避免吸湿。溶解时建议使用无水有机溶剂 (如 DMF 或 DMSO), 操作应在通风橱中进行, 避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行严格质量控制, 确保纯度 >96%。安全信息如下:

- 可能对眼睛、皮肤和呼吸道有刺激性, 操作时需佩戴防护手套、护目镜和口罩。

- 若不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。
- 废弃物应按照危险化学品处理规范处置，避免环境污染。

以上信息仅供参考，具体实验方案需结合实际需求调整。