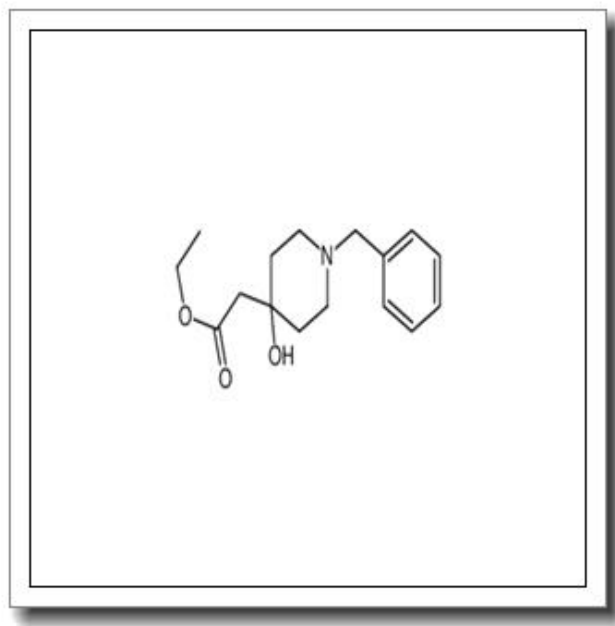


2-(1-苄基-4-羟基哌啶-4-基)乙酸乙酯

Ethyl (1-benzyl-4-hydroxy-4-piperidinyl)acetate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Ethyl (1-benzyl-4-hydroxy-4-piperidinyl)acetate
中文名称	2-(1-苄基-4-羟基哌啶-4-基)乙酸乙酯
CAS 号	67281-07-6
分子式	C ₁₆ H ₂₃ N ₁ O ₃
分子量	277.359
纯度	≥96%

产品说明

2-(1-苄基-4-羟基哌啶-4-基)乙酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品化学名称为 Ethyl (1-benzyl-4-hydroxy-4-piperidiny)acetate, CAS 号 67281-07-6, 分子式 C₁₆H₂₃N₀₃, 分子量 277.359, 是一种白色至类白色结晶或粉末状有机化合物。其结构中包含哌啶环、苄基及酯基官能团, 具有中等极性, 可溶于常见有机溶剂如乙醇、甲醇和二甲基亚砷 (DMSO), 微溶于水。纯度标准 ≥96% (HPLC), 需避光保存以维持稳定性。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌啶类衍生物, 该化合物在药物化学中具有重要价值。其羟基和酯基结构赋予其良好的反应活性, 可作为中间体用于合成镇痛剂、抗胆碱能药物及中枢神经系统调节剂。哌啶环的刚性结构有助于增强与生物靶点的结合能力, 在构效关系研究中常用于优化药物分子的亲脂性与血脑屏障穿透性。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于医药研发领域: 一是作为关键中间体用于合成阿片类镇痛药 (如芬太尼衍生物) 的修饰前体; 二是在神经药理研究中用于构建胆碱酯酶抑制剂或 NMDA 受体拮抗剂的分子骨架; 三是在有机合成中通过酯水解或还原反应制备羧酸或醇类衍生物。实验室级产品适用于小规模工艺开发及结构活性研究。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中, 置于干燥、避光、-20℃至 4℃环境下, 长期保存建议充氮保护。使用前需恢复至室温以避免结露, 称量应在通风橱中进行。建议溶解于无水乙醇或 DMSO 后使用, 工作浓度需根据实验体系优化。开封后建议一次性用完, 剩余产品需严格密封。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC、NMR 及质谱分析确认结构, 水分含量 ≤0.5%, 残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据: LD₅₀ (大鼠口服) 约 1200 mg/kg, 属于刺激性物质, 操作时需佩

戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套。如接触皮肤，立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物应作为有害化学品处置，遵守当地环保法规。

注：本说明仅限专业研究人员参考，不可替代实际实验评估。具体应用需结合文献与预实验数据验证。