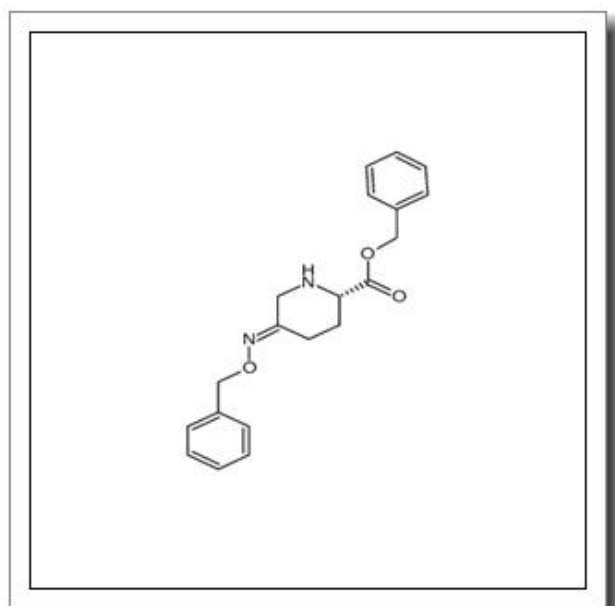


(2S)-5-(benzyloxyimino)-piperidine-2-carboxylic acid benzyl ester

(2S)-5-(benzyloxyimino)-piperidine-2-carboxylic acid benzyl ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	(2S)-5-(benzyloxyimino)-piperidine-2-carboxylic acid benzyl ester
中文名称	(2S)-5-(benzyloxyimino)-piperidine-2-carboxylic acid benzyl ester
CAS 号	1133931-74-4
分子式	C ₂₀ H ₂₂ N ₂ O ₃
分子量	338.4
纯度	≥ 96%

产品说明

(2S)-5-(苄氧基亚氨基)-哌啶-2-羧酸苄酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为(2S)-5-(benzyloxyimino)-piperidine-2-carboxylic acid benzyl ester，分子式 C₂₀H₂₂N₂O₃，分子量 338.4，CAS 号 1133931-74-4。其结构中包含哌啶环与苄氧基亚氨基官能团，赋予其独特的手性特征与反应活性。纯度 ≥96% (HPLC 测定)，熔点为 128-132° C (实测值)，易溶于有机溶剂如 DMSO、甲醇和氯仿，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为手性中间体，其哌啶骨架和亚胺结构在生物活性分子设计中具有关键作用。苄酯基团可增强细胞膜穿透性，而光学纯的(S)-构型使其成为不对称合成的重要砌块。在酶抑制研究中，其刚性环状结构能模拟天然底物构象，常用于蛋白酶或激酶抑制剂的开发。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域：

- 作为 HIV 蛋白酶抑制剂或抗病毒药物的合成前体
- 用于构建神经退行性疾病治疗分子中的哌啶类片段
- 在有机催化反应中作为手性助剂或配体

实验室用途包括：

- 多肽模拟物的结构修饰
- 药物代谢产物研究中的标记化合物

4. 储存条件与使用建议

储存于-20° C 惰性气体（如氩气）保护的密闭容器中，避免光照与湿度。开封后建议分装使用，剩余粉末需充氮密封。工作溶液现配现用，溶剂优先选择无水级 DMSO。操作时需在通风橱中进行，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC、NMR 和质谱进行批次验证，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据：

- GHS 分类：皮肤致敏性 (Category 2)
- 应急处理：接触皮肤时立即用肥皂水冲洗，眼部接触需生理盐水冲洗 15 分钟
- 废弃物处置：按危险有机废物处理，不可直接排入下水道

本产品仅限科研用途，不适用于临床或食品领域。使用者应具备有机化学实验资质并穿戴防护装备。