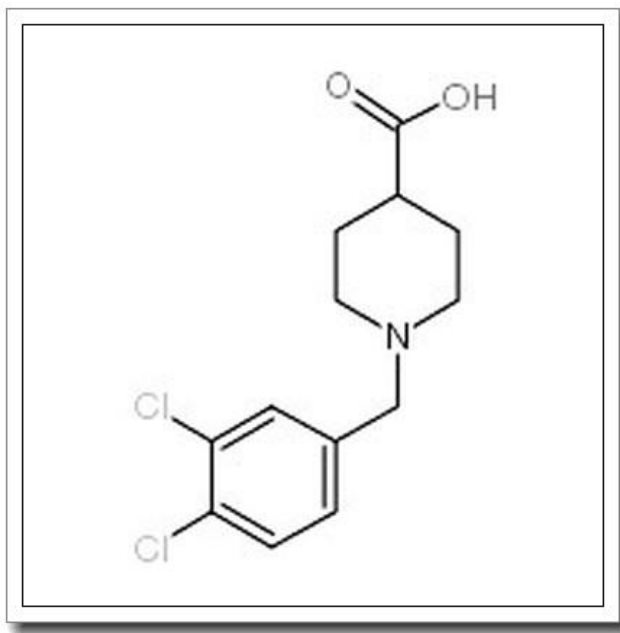


1-(3,4-二氯苄基)-哌啶-4-羧酸

1-[(3,4-dichlorophenyl)methyl]piperidine-4-carboxylic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-[(3,4-dichlorophenyl)methyl]piperidine-4-carboxylic acid
中文名称	1-(3,4-二氯苄基)-哌啶-4-羧酸
CAS 号	147959-16-8
分子式	C ₁₃ H ₁₅ Cl ₂ N ₂ O ₂
分子量	288.17
纯度	>96%

产品说明

1-[(3,4-二氯苯基)甲基]哌啶-4-羧酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 1-[(3,4-dichlorophenyl)methyl]piperidine-4-carboxylic acid，分子式 $C_{13}H_{15}Cl_2N_2O_2$ ，分子量 288.17，CAS 登记号 147959-16-8。其结构中包含哌啶环与二氯苄基的刚性组合，羧酸基团赋予其两亲性特征。纯度经 HPLC 验证 $\geq 96\%$ ，熔点为 210-215°C（分解），易溶于极性有机溶剂如 DMSO 和甲醇，微溶于水（25°C 时溶解度 $< 0.1 \text{ mg/mL}$ ）。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为哌啶羧酸衍生物，可通过其羧酸基团参与分子间氢键或金属配位作用，哌啶环的碱性氮原子可质子化形成阳离子中心。二氯苄基结构增强了疏水相互作用，使其在受体结合研究中表现出特异性靶向潜力。在药物化学中，此类结构常作为中间体用于构建神经调节剂或抗炎分子的核心骨架。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域：

- 3.1 作为激酶抑制剂或 GPCR 配体的关键合成砌块
- 3.2 用于构效关系研究中优化先导化合物的亲脂性参数
- 3.3 在放射性标记实验中作为示踪分子的前体
- 3.4 可能用于开发抗寄生虫或中枢神经系统疾病治疗药物

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，置于 -20°C 干燥避光环境，惰性气体保护可延长稳定性。开封后建议分装使用，避免反复冻融。实验操作需在通风橱中进行，佩戴防尘口罩及丁腈手套。溶解时优先选用预纯化的 DMSO，配制工作液后建议 24 小时内使用完毕。

5. 质量控制与安全信息

批次质检报告包含：

5.1 HPLC 纯度检测图谱（保留时间 4.32 ± 0.2 分钟）

5.2 水分含量（卡尔费休法） $\leq 0.5\%$

5.3 残留溶剂（GC-MS）符合 ICH Q3C 标准

安全警示：

5.4 急性毒性（大鼠口服 LD₅₀） >2000 mg/kg

5.5 对眼睛和皮肤有轻微刺激性，接触后立即用大量清水冲洗

5.6 废弃物处置需遵循当地危险化学品管理法规

注：本产品仅限科研用途，不可用于人体或动物诊疗。具体应用方案建议通过预实验优化条件。