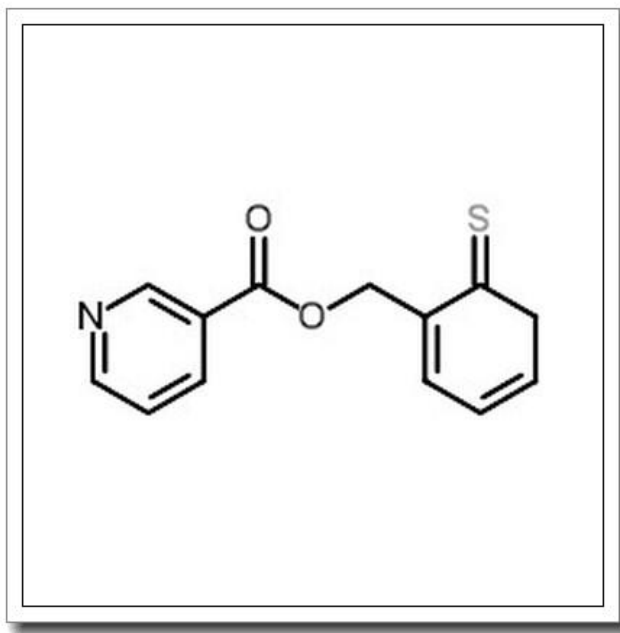


# 2-苄硫基烟酸

*2-benzylsulfanylpyridine-3-carboxylic acid*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	2-benzylsulfanylpyridine-3-carboxylic acid
中文名称	2-苄硫基烟酸
CAS 号	112811-90-2
分子式	C <sub>13</sub> H <sub>11</sub> N <sub>1</sub> O <sub>2</sub> S
分子量	245.297
纯度	>96%

## 产品说明

### 2-苄硫基烟酸产品说明书

#### 产品概述与化学特性

2-苄硫基烟酸 (2-benzylsulfanylpiperidine-3-carboxylic acid) 是一种含硫杂环羧酸化合物，化学式为  $C_{13}H_{11}NO_2S$ ，分子量 245.297，CAS 号为 112811-90-2。其结构由吡啶环、羧酸基团及苄硫基组成，赋予其独特的化学性质。本品为白色至类白色结晶性粉末，纯度 >96%，可溶于有机溶剂如 DMSO 和甲醇，微溶于水。其硫醚结构使其在氧化还原反应中具有较高反应活性。

#### 生物化学功能与重要性

作为烟酸衍生物，2-苄硫基烟酸在生物体系中表现出多功能性。其羧酸基团可参与金属配位或形成氢键，而苄硫基可作为亲核试剂或自由基捕获剂。该化合物在酶抑制研究中显示潜力，尤其针对含巯基的蛋白酶或氧化还原相关酶类。其结构特性使其成为药物化学中构建杂环骨架的重要中间体。

#### 主要应用领域与具体用途

1. 医药研发：用于合成抗炎、抗菌或抗肿瘤活性分子的关键中间体，如噻唑并吡啶类化合物。
2. 材料科学：作为配体参与金属有机框架 (MOF) 材料的合成，或用于功能化高分子材料。
3. 生化研究：在蛋白质修饰或荧光探针开发中作为硫醇反应性试剂。
4. 农业化学：用于新型农药分子结构中杂环模块的构建。

#### 储存条件与使用建议

本品需避光密封保存于  $-20^{\circ}C$  至  $4^{\circ}C$  干燥环境中，长期储存建议充氮保护。开封后需尽快使用，避免反复冻融。实验操作应在通风橱中进行，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。建议使用惰性溶剂（如无水 DMF）溶解，并在惰性气体保护下进行敏感反应。

### 质量控制与安全信息

通过 HPLC 验证纯度>96%，水分含量<0.5%，残留溶剂符合 ICH 标准。本品属于刺激性化学品，接触后需立即用大量清水冲洗。安全数据表（SDS）显示其急性毒性 LD50（大鼠口服）>2000 mg/kg，但仍需佩戴防护手套及护目镜操作。废弃物处置应遵守当地危险化学品管理法规。

本产品仅供科研用途，不适用于临床或食品领域。具体应用需根据实验设计进一步优化条件。