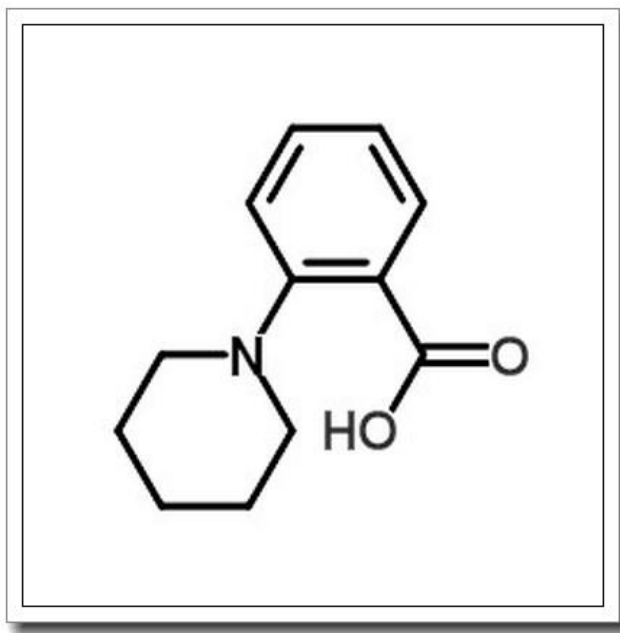


2-哌啶苯甲酸

2-piperidin-1-ylbenzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-piperidin-1-ylbenzoic acid
中文名称	2-哌啶苯甲酸
CAS 号	42093-97-0
分子式	C ₁₂ H ₁₅ N ₂ O ₂
分子量	205.253
纯度	>96%

产品说明

2-哌啶苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-哌啶苯甲酸 (2-piperidin-1-ylbenzoic acid) 是一种含氮杂环羧酸化合物，化学式为 $C_{12}H_{15}NO_2$ ，分子量 205.253。该物质为白色至类白色结晶性粉末，CAS 登记号 42093-97-0。其结构中苯甲酸基团与哌啶环通过氮原子相连，形成具有两亲性的特殊分子构型。本产品经 HPLC 检测纯度 >96%，符合生化试剂标准。

2. 生物化学功能与重要性

作为哌啶类衍生物，该化合物表现出显著的生物活性。其分子中的羧基可参与酯化、酰胺化等反应，哌啶环则赋予分子碱性特征和空间位阻效应。这种独特结构使其成为药物研发中重要的中间体，特别在神经递质调节剂和 GPCR 靶向化合物的合成中具有关键作用。其理化性质也适用于金属离子螯合和酶活性位点模拟研究。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域，本品主要用于阿尔茨海默症治疗药物的先导化合物合成，以及镇痛剂的结构修饰。材料科学中可作为有机配体制备功能化金属有机框架 (MOFs)。实验室常用作：1) 胆碱酯酶抑制实验的阳性对照物；2) 分子印迹聚合物模板分子；3) 液相色谱手性分离添加剂。建议工作浓度范围为 0.1-10mM，具体需根据实验体系优化。

4. 储存条件与使用建议

本品应避光保存于 2-8°C 干燥环境中，开封后建议充氮密封。在无水乙醇或 DMSO 中溶解性良好 (>50mg/mL)，水溶液需调节 pH 至碱性促进溶解。实验操作建议在通风橱中进行，避免直接接触皮肤。配制的溶液如需长期保存，建议分装后 -20°C 冷冻，避免反复冻融。

5. 质量控制与安全信息

批次质量控制包括熔点测定 (标准范围 158-161°C)、FTIR 光谱验证和残留溶剂检测。安全数据：LD50 (大鼠经口) >2000mg/kg，属于刺激性物质 (GHS 分类

Category 2)。操作时需佩戴防护眼镜和丁腈手套，如接触眼睛应立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物处理应遵守当地危险化学品处置法规。