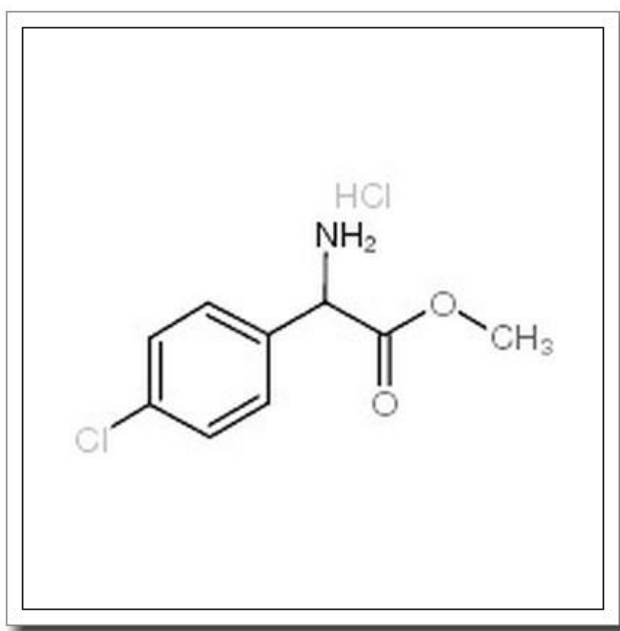


1-(4-氯苯基)-2-甲氧基-2-氧代-1-氯化铵

methyl 2-amino-2-(4-chlorophenyl)acetate, hydrochloride



产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 2-amino-2-(4-chlorophenyl)acetate, hydrochloride
中文名称	1-(4-氯苯基)-2-甲氧基-2-氧代-1-氯化铵
CAS 号	42718-19-4
分子式	C9H11ClN2O2
分子量	236.095
纯度	>96%

产品说明

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 methyl 2-amino-2-(4-chlorophenyl)acetate, hydrochloride (盐酸甲基 2-氨基-2-(4-氯苯基)乙酸酯)，中文别名 1-(4-氯苯基)-2-甲氧基-2-氧代-1-氯化铵。CAS 号为 42718-19-4，分子式 C₉H₁₁ClN₂O₂，分子量 236.095。纯度经 HPLC 检测 ≥96%，易溶于甲醇、乙醇等极性有机溶剂，微溶于水。其结构中的氯苯基与酯键赋予其特定反应活性，是合成医药中间体的关键原料。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为手性氨基酯衍生物，可通过水解、缩合等反应转化为 α-氨基酸类物质，在生物碱合成中扮演重要角色。其 4-氯苯基结构能增强脂溶性，便于穿透细胞膜，而盐酸盐形式提高了稳定性和储存便利性。在药物研发中，常用于构建抗菌剂、镇痛剂等活性分子的核心骨架。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于医药和农药中间体合成领域。在医药方面，可用于制备非甾体抗炎药（如双氯芬酸类似物）及中枢神经系统药物前体；在农药领域，作为杀菌剂或除草剂的修饰基团。实验室中亦用于研究手性催化反应及酶促动力学模型。

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 2-8℃ 干燥避光环境中，长期储存需充氮保护。开封后需尽快使用，避免反复冻融。操作时穿戴防护手套、护目镜及防尘口罩，在通风橱中进行称量。溶解建议使用无水乙醇或 DMF，避免与强氧化剂接触。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 GC-MS 和核磁共振谱 (NMR) 验证结构，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据表明，其急性毒性 (LD₅₀ 大鼠口服) 为 1250 mg/kg，属于刺激性物质，接触皮肤或眼睛需立即用大量清水冲洗。废弃物处置应遵守当地危险化学品管理条例，不可直接排入下水道。

(注: 实际使用前请务必查阅最新版物质安全数据表 MSDS 并开展风险评估。)