

(S)-1-(3,5-二氟苯基)乙胺盐酸盐

(1S)-1-(3,5-Difluorophenyl)ethanamine hydrochloride (1:1)



产品基本信息

| 属性 | 值 |
|-------|---|
| 化学名称 | (1S)-1-(3,5-Difluorophenyl)ethanamine hydrochloride (1:1) |
| 中文名称 | (S)-1-(3,5-二氟苯基)乙胺盐酸盐 |
| CAS 号 | 1213128-98-3 |
| 分子式 | C ₈ H ₁₀ F ₂ N |
| 分子量 | 193.622 |
| 纯度 | >96% |

产品说明

(S)-1-(3,5-二氟苯基)乙胺盐酸盐产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为(1S)-1-(3,5-Difluorophenyl)ethanamine hydrochloride (1:1)，是一种手性有机化合物，分子式为C₈H₁₀ClF₂N，分子量193.622，CAS号1213128-98-3。其结构包含一个光学活性的(S)-构型乙胺基团与3,5-二氟苯环，以盐酸盐形式稳定存在。外观通常为白色至类白色结晶性粉末，纯度≥96%（HPLC测定），易溶于水及极性有机溶剂（如甲醇、乙醇）。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为手性胺类衍生物，其3,5-二氟苯基结构赋予其独特的电子效应和空间位阻，在生物活性分子设计中常用于调节脂溶性、代谢稳定性和靶标结合亲和力。其(S)-构型在不对称合成中具有立体选择性优势，是构建中枢神经系统药物（如5-HT受体调节剂）和酶抑制剂的关键中间体。

3. 主要应用领域与具体用途

医药研发领域：用于合成抗抑郁、抗焦虑及神经退行性疾病候选药物的手性砌块。
有机合成领域：作为不对称催化反应的配体或底物，参与C-N键形成等关键步骤。
分析化学领域：用作手性拆分试剂或色谱分析对照品。

4. 储存条件与使用建议

储存条件：密封避光保存于-20° C干燥环境中，长期储存建议充惰性气体保护。
使用建议：实验前恢复至室温以避免吸湿，称量需在干燥环境下进行。建议以DMSO或去离子水配制母液（浓度≤10 mM），现配现用。

5. 质量控制与安全信息

质量控制：通过HPLC、NMR和质谱进行批次一致性验证，残留溶剂符合ICH Q3C标准。

安全信息：本品为刺激性化学品，操作时需佩戴防护手套、护目镜及防尘口罩。避

免吸入或接触皮肤，如不慎接触，立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需符合当地危险化学品管理法规。

（注：本说明基于现有研究数据编制，具体应用需结合实验条件进一步验证。）