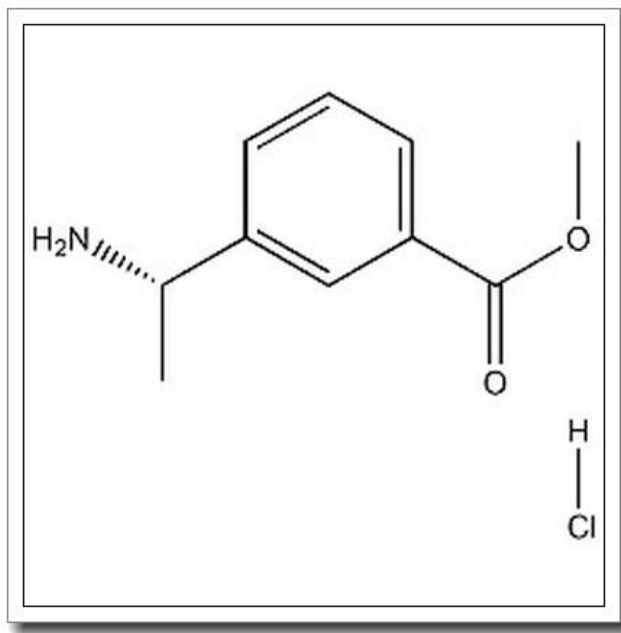


(S)-3-(1-氨基乙基)苯甲酸甲酯盐酸盐

(S)-3-(1-Amino-ethyl)-benzoic acid methyl ester hydrochloride



产品基本信息

属性	值
化学名称	(S)-3-(1-Amino-ethyl)-benzoic acid methyl ester hydrochloride
中文名称	(S)-3-(1-氨基乙基)苯甲酸甲酯盐酸盐
CAS 号	1391439-19-2
分子式	C ₁₀ H ₁₄ ClN ₂ O ₂
分子量	215.67666
纯度	>96%

产品说明

(S)-3-(1-氨基乙基)苯甲酸甲酯盐酸盐产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为(S)-3-(1-氨基乙基)苯甲酸甲酯盐酸盐,英文名称(S)-3-(1-Amino-ethyl)-benzoic acid methyl ester hydrochloride, CAS号1391439-19-2,分子式C₁₀H₁₄ClN₂O₂,分子量215.68。该化合物为白色至类白色结晶性粉末,纯度≥96%,属于手性氨基酸衍生物,其(S)-构型在生物活性中具有特异性。盐酸盐形式提高了化合物的水溶性与稳定性,适合医药研发及生化实验应用。

2. 生物化学功能与重要性

该分子结构包含苯甲酸酯基团和手性氨基乙基侧链,可作为手性合成砌块或药物中间体,尤其用于构建β-氨基酸类化合物。其(S)-构型与多种生物酶或受体的立体选择性结合相关,在神经递质调节剂、蛋白酶抑制剂等药物研发中具有潜在价值。盐酸盐形式进一步增强了其与生物体系的相容性。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药化学和生物化学领域:一是作为手性中间体用于抗抑郁、抗肿瘤等小分子药物的合成;二是在酶学研究中作为底物或抑制剂探针,用于立体选择性反应机制分析;三是用于制备液晶材料或功能性高分子单体。具体用途需结合实验方案优化投料比例。

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中,避光、防潮,建议温度2-8℃,长期保存需充氮保护。使用前需平衡至室温,避免反复冻融。溶解推荐使用无水乙醇或DMF,水溶液需现配现用。操作时佩戴防护手套及护目镜,确保通风良好。

5. 质量控制与安全信息

本品经HPLC检测纯度≥96%,残留溶剂符合ICH标准。安全数据:急性毒性(LD₅₀)未明确,对皮肤和眼睛有刺激性,误接触需立即用清水冲洗15分钟并就

医。废弃处置需符合当地化学品管理法规。运输分类为非危险品，但建议按一般化学品规范操作。

注：本说明基于现有实验数据编制，具体应用需用户进一步验证。