

3-[(1S)-1-Amino-2,2,2-trifluoroethyl]benzoic acid hydrochloride (1:1)

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	3-[(1S)-1-Amino-2,2,2-trifluoroethyl]benzoic acid hydrochloride (1:1)
产品目录号	
CAS 号	1391384-65-8
分子式	C ₉ H ₉ C ₁ F ₃ N ₀ O ₂
分子量	255.622
纯度	>96%

产品说明

3-[(1S)-1-氨基-2,2,2-三氟乙基]苯甲酸盐产品说明书

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 3-[(1S)-1-氨基-2,2,2-三氟乙基]苯甲酸盐 (1:1)，CAS 号 1391384-65-8，分子式 C₉H₉ClF₃N₂O₂，分子量 255.622。其结构包含手性中心(S 构型)和三氟甲基官能团，赋予分子独特的立体选择性和代谢稳定性。纯度经 HPLC 验证 ≥96%，易溶于极性有机溶剂（如 DMSO、甲醇），水溶液中呈酸性。

2. 生物化学功能与重要性

作为含氟手性胺类衍生物，该化合物兼具苯甲酸骨架的刚性结构和三氟乙基的强电负性，可显著调节靶标蛋白的亲和力。其氨基与羧基的共存使其成为药物设计中重要的中间体，尤其适用于构建酶抑制剂或受体调节剂。三氟甲基的引入能增强脂溶性和代谢稳定性，在优化先导化合物药代动力学特性中具有关键作用。

3. 主要应用领域与具体用途

本品广泛应用于医药研发领域：

- 作为手性合成子用于抗肿瘤、抗炎药物的结构修饰
- 用于蛋白酶抑制剂（如组织蛋白酶 K）的构效关系研究
- 在 PET 显影剂开发中作为含氟标记前体
- 作为标准品用于 LC-MS 方法开发与代谢物鉴定

4. 储存条件与使用建议

长期储存需置于-20℃、避光、干燥环境中，开封后建议充氮保存。使用前需平衡至室温以避免吸湿。推荐工作浓度根据实验体系优化，溶解时优先选用无水 DMSO 配制母液（10-50 mM），后续用缓冲液稀释至目标浓度。注意避免反复冻融，溶液状态建议现配现用。

5. 质量控制与安全信息

批次质检报告包含 HPLC 纯度（≥96%）、旋光度、水分及残留溶剂数据。本品属于

刺激性化学品，操作时需佩戴防护手套、护目镜，在通风橱中进行。皮肤接触后应立即用大量清水冲洗，吸入暴露需转移至空气新鲜处。废弃物处置应符合当地危险化学品管理规定。安全数据表（SDS）可随货提供或联系供应商获取。

（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验证。产品规格可能因批次调整，请以随货质检报告为准。）