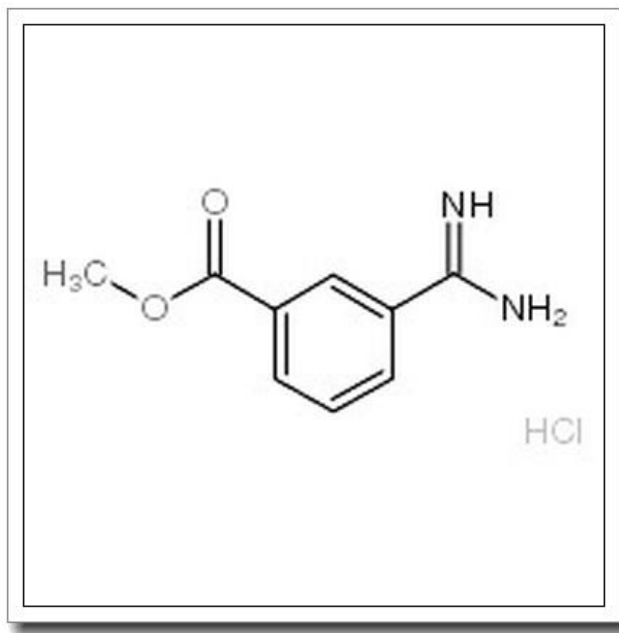


# 3-甲脒基苯甲酸甲酯盐酸盐

*methyl 3-carbamimidoylbenzoate, hydrochloride*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	methyl 3-carbamimidoylbenzoate, hydrochloride
中文名称	3-甲脒基苯甲酸甲酯盐酸盐
CAS 号	18219-39-1
分子式	C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> ClN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量	214.649
纯度	>96%

## 产品说明

### 3-甲脒基苯甲酸甲酯盐酸盐产品说明书

#### 1. 产品概述与化学特性

3-甲脒基苯甲酸甲酯盐酸盐 (methyl 3-carbamimidoylbenzoate, hydrochloride) 是一种有机化合物，化学式为  $C_9H_{11}ClN_2O_2$ ，分子量为 214.649。其 CAS 号为 18219-39-1，外观通常为白色至类白色结晶性粉末。该化合物在常温下稳定，易溶于水及极性有机溶剂（如甲醇、乙醇），纯度标准高于 96%，符合生化试剂的高规格要求。其结构中的甲脒基 ( $-C(=NH)NH_2$ ) 和酯基 ( $-COOCH_3$ ) 赋予其独特的反应活性，适用于多种有机合成与生物化学应用。

#### 2. 生物化学功能与重要性

作为甲脒基苯甲酸衍生物，该化合物在生物化学中常作为中间体或修饰基团参与反应。其甲脒基团可模拟精氨酸的胍基结构，在酶抑制剂设计或蛋白质相互作用研究中具有潜在价值。此外，酯基的存在使其易于通过水解或酯交换反应进一步功能化，为药物分子或探针的合成提供灵活修饰位点。

#### 3. 主要应用领域与具体用途

本产品广泛应用于医药研发、有机合成及生化研究领域。具体用途包括：

- 作为合成抗凝血药物或蛋白酶抑制剂的中间体；
- 用于构建含甲脒基的荧光标记物或生物探针；
- 在金属有机框架 (MOF) 材料制备中作为配体前体；
- 作为生化试剂用于酶学或分子生物学实验中的功能基团引入。

#### 4. 储存条件与使用建议

建议在干燥、避光条件下储存，温度控制在  $2-8^{\circ}C$  以保持长期稳定性。开封后需密封保存，避免吸湿。使用时需佩戴防护手套、护目镜及实验服，在通风橱中操作。溶解建议使用去离子水或无水乙醇，配制后溶液建议现配现用，避免反复冻融。

#### 5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 检测确认纯度  $\geq 96\%$ ，并符合核磁共振 (NMR) 及质谱 (MS) 标

准。安全信息提示：该化合物可能对眼睛、皮肤及呼吸道产生刺激性，操作时应避免直接接触。若不慎吸入或接触，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处置需遵循当地化学品管理法规。

（注：本说明基于现有研究数据，具体应用需结合实验条件进一步优化。）