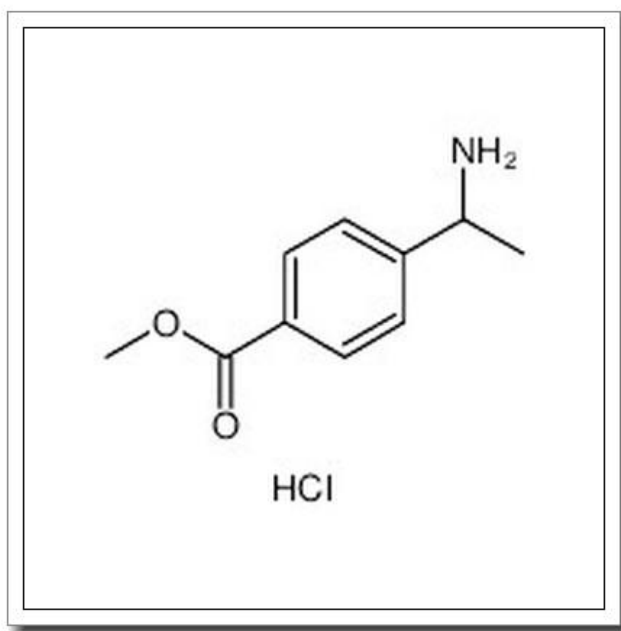


Benzoic acid, 4-(1-aminoethyl)-, methyl ester, hydrochloride

Benzoic acid, 4-(1-aminoethyl)-, methyl ester, hydrochloride



产品基本信息

属性	值
化学名称	Benzoic acid, 4-(1-aminoethyl)-, methyl ester, hydrochloride
中文名称	Benzoic acid, 4-(1-aminoethyl)-, methyl ester, hydrochloride
CAS 号	934388-45-1
分子式	C ₁₀ H ₁₄ ClN ₂ O ₂
分子量	215.677
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 4-(1-氨基乙基)苯甲酸甲酯盐酸盐，CAS 号为 934388-45-1，分子式为 C₁₀H₁₄ClN₂O₂，分子量为 215.677。其纯度经高效液相色谱（HPLC）检测确认大于 96%，结构中含有苯甲酸酯基团及氨基乙基侧链，盐酸盐形式增强了水溶性和稳定性。该化合物在常温下稳定，易溶于极性有机溶剂如甲醇、乙醇，微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

作为苯甲酸衍生物，该化合物可通过酯键水解释放活性基团，其氨基乙基结构赋予其潜在的生物活性，如作为酶抑制剂或受体配体的中间体。在药物化学中，此类结构常作为药效团载体，用于抗菌、抗炎或神经调节类药物的合成前体。其盐酸盐形式可优化药物分子的生物利用度。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要用于医药研发领域，具体包括：

- 作为手性合成中间体，用于构建 β -肾上腺素受体激动剂或拮抗剂的核心骨架
- 在抗菌药物设计中，作为苯环修饰的模板化合物
- 用于荧光标记探针的合成，因其苯环结构可耦合发光基团
- 实验室规模有机合成中，作为氨基保护或去保护策略的原料

4. 储存条件与使用建议

建议密封保存于 2-8°C 干燥环境中，避免光照及潮湿。开封后需充惰性气体保护以延长稳定性。使用时需在通风橱中操作，佩戴防护手套和护目镜。溶解推荐使用无水乙醇或 DMF，水溶液需现配现用，pH 值应调节至中性以避免酯键水解。

5. 质量控制与安全信息

本产品经质谱（MS）和核磁共振（NMR）验证结构，HPLC 检测残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据表明其急性毒性（LD₅₀）为小鼠口服 >2000 mg/kg，但仍需避免吸入

或皮肤直接接触。废弃物处理需遵循危险化学品管理条例，建议通过专业机构焚烧处置。

（注：实际应用中请以最新版安全技术说明书（MSDS）和质检报告为准。）