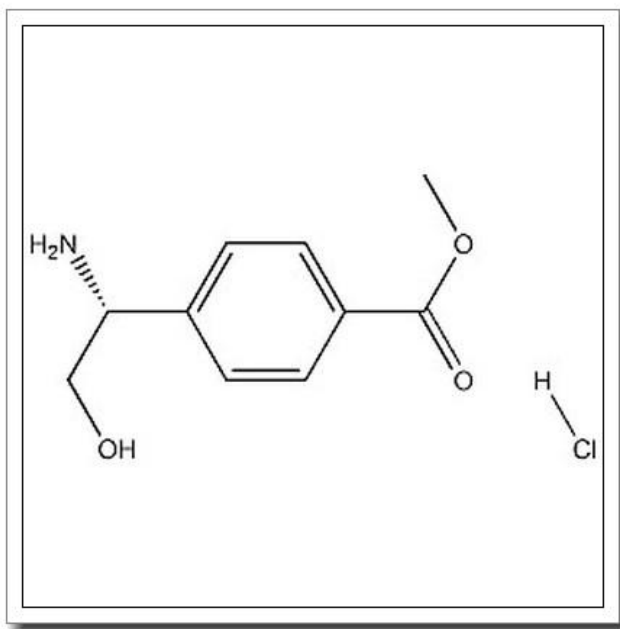


METHYL 4-((1R)-1-AMINO-2-HYDROXYETHYL)BENZOATE HCl

METHYL 4-((1R)-1-AMINO-2-HYDROXYETHYL)BENZOATE HCl



产品基本信息

属性	值
化学名称	METHYL 4-((1R)-1-AMINO-2-HYDROXYETHYL)BENZOATE HCl
中文名称	METHYL 4-((1R)-1-AMINO-2-HYDROXYETHYL)BENZOATE HCl
CAS 号	1196049-17-8
分子式	C ₁₀ H ₁₄ ClN ₃ O ₃
分子量	231.67606
纯度	>96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

METHYL 4-((1R)-1-AMINO-2-HYDROXYETHYL)BENZOATE HCl (CAS 号: 1196049-17-8) 是一种高纯度的有机化合物, 分子式为 $C_{10}H_{14}ClN_2O_3$, 分子量为 231.67606。该化合物以盐酸盐形式存在, 纯度超过 96%, 具有明确的手性中心 (1R 构型)。其结构包含苯甲酸甲酯骨架, 并在对位取代有 1-氨基-2-羟乙基基团, 赋予其独特的极性和反应活性。该物质在常温下为白色至类白色结晶或粉末, 易溶于水、甲醇等极性溶剂, 但在非极性溶剂中溶解度较低。

2. 生物化学功能与重要性

作为手性氨基醇衍生物, 该化合物在生物化学领域具有重要价值。其结构中的氨基和羟基官能团使其能够参与多种生物分子相互作用, 例如作为酶抑制剂或受体配体的合成中间体。手性中心的 R 构型使其在立体选择性合成中尤为关键, 可用于构建具有特定生物活性的分子。此外, 苯甲酸酯部分提供了良好的脂溶性平衡, 有助于跨膜运输研究。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要应用于医药研发和精细化工领域。在药物化学中, 它是合成 β -肾上腺素能受体激动剂或拮抗剂的重要前体, 尤其用于开发心血管或呼吸系统药物。在不对称合成中, 可作为手性辅助剂或催化剂配体。此外, 也用于荧光标记探针的制备, 或作为蛋白质交联研究的修饰试剂。科研级产品适用于体外实验, 需进一步纯化后方可用于体内研究。

4. 储存条件与使用建议

建议在 2-8°C 的干燥避光环境中密封保存, 长期储存需充惰性气体保护。开封后应尽快使用, 避免反复冻融。使用时需在干燥惰性气氛 (如氮气手套箱) 中操作, 防止吸湿降解。溶解推荐使用去离子水或无水 DMSO, 配制后溶液建议现配现用。工作浓度需根据具体实验体系优化, 建议先进行小剂量测试。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC、NMR 和质谱进行严格质量控制，确保化学纯度和立体构型准确。安全数据表明，该化合物可能引起眼睛和皮肤刺激，操作时应佩戴防护眼镜、手套，并在通风橱中进行。如接触皮肤，立即用大量清水冲洗至少 15 分钟。废弃物需按危险化学品处理规范处置。详细安全信息请参阅随附的 MSDS（物质安全数据表）。