

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

产品图片未找到

产品基本信息

属性	值
化学名称	(S)-3-(1-Amino-ethyl)-benzoic acid methyl ester hydrochloride
产品目录号	
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

产品说明

1. 产品概述与化学特性

(S)-3-(1-氨基-乙基)-苯甲酸甲酯盐酸盐 (化学名称: (S)-3-(1-Amino-ethyl)-benzoic acid methyl ester hydrochloride) 是一种手性有机化合物, 其分子式为 C₁₀H₁₄ClN₂O₂, 分子量为 215.67666。该化合物以盐酸盐形式存在, 纯度高于 96%, CAS 号为 1391439-19-2。其结构包含苯甲酸甲酯骨架及(S)-构型的氨基乙基侧链, 具有明确的立体化学特性, 适用于对光学纯度要求较高的合成与生物化学研究。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为手性砌块 (chiral building block), 在药物化学和生物活性分子合成中具有重要价值。其氨基和酯基官能团可进一步衍生化, 参与酰胺化、缩合等反应, 用于构建复杂分子结构。此外, (S)-构型使其在针对特定靶点的活性分子设计中具有潜在优势, 尤其在神经科学、酶抑制剂开发等领域受到关注。

3. 主要应用领域与具体用途

- 药物研发: 作为中间体用于合成具有生物活性的手性药物候选分子。
- 有机合成: 用于不对称合成或作为手性助剂, 提高反应的立体选择性。
- 生化研究: 可能用于酶底物或受体配体的结构修饰, 探索构效关系。

4. 储存条件与使用建议

- 储存条件: 建议密封保存于 2-8° C 干燥环境中, 避免光照与潮湿。长期储存需充惰性气体保护。
- 使用建议: 使用前恢复至室温, 避免反复冻融。在通风橱中操作, 佩戴防护装备 (手套、护目镜)。溶解性测试推荐使用甲醇或 DMSO 等极性溶剂。

5. 质量控制与安全信息

- 质量控制: 通过 HPLC 测定纯度 (>96%), 并辅以质谱与核磁共振 (NMR) 验证结构。

- 安全信息: 本品为刺激性化合物, 避免吸入或接触皮肤。若不慎接触, 立即用大量清水冲洗并就医。废弃物需按危险化学品规范处置。

本产品仅供科研用途, 不适用于人体或动物直接使用。具体实验方案需结合文献与安全评估进行优化。