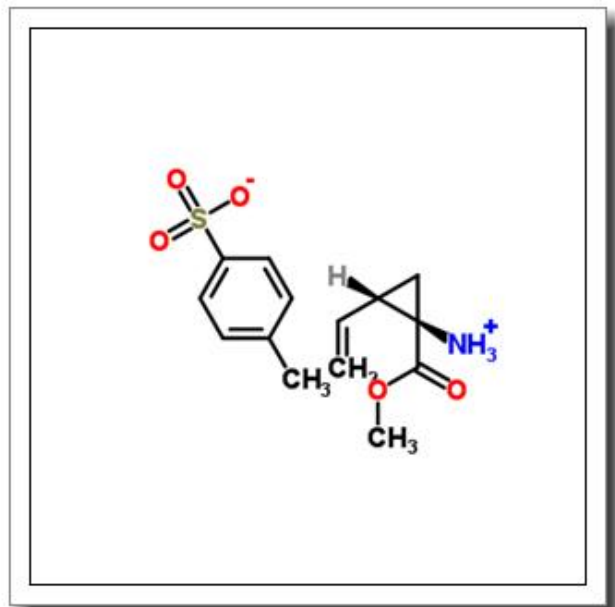


(1R,2S)-1-氨基-2-乙烯基环丙烷甲酸甲酯 4-甲基苯磺酸盐

4-methylbenzenesulfonate



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-methylbenzenesulfonate
中文名称	(1R, 2S)-1-氨基-2-乙烯基环丙烷甲酸甲酯 4-甲基苯磺酸盐
CAS 号	862273-27-6
分子式	C14H19NO5S
分子量	313.369
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本品为(1R, 2S)-1-氨基-2-乙基环丙烷甲酸甲酯的 4-甲基苯磺酸盐，化学名称为 4-methylbenzenesulfonate，CAS 号 862273-27-6。其分子式为 C₁₄H₁₉N₀₅S，分子量 313.369，纯度 ≥96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末，易溶于极性有机溶剂如甲醇、乙醇，微溶于水。结构中含有的环丙烷基团和氨基甲酸酯键赋予其独特的立体化学特性，而 4-甲基苯磺酸根则增强了其稳定性和溶解性。

2. 生物化学功能与重要性

作为手性环丙烷衍生物，该化合物在生物化学中具有显著意义。其环丙烷结构可模拟肽键的刚性构象，常用于药物设计中作为构象限制单元。氨基甲酸酯部分可参与氢键形成，增强与生物靶点的相互作用。4-甲基苯磺酸盐形式不仅提高了结晶性，还优化了其药代动力学性质，使其成为医药中间体开发的重要候选分子。

3. 主要应用领域与具体用途

本品主要应用于医药研发领域，特别适用于以下场景：作为手性合成子用于抗病毒药物（如 HCV 蛋白酶抑制剂）的制备；在神经保护剂开发中作为 γ -氨基丁酸受体调节剂的前体；还可用于催化不对称合成研究。其高纯度特性使其符合 GMP 标准下原料药生产的质量要求。

4. 储存条件与使用建议

建议在 2-8°C 避光干燥环境中保存，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，配制溶液建议现配现用。与强氧化剂、强酸强碱需隔离存放。

5. 质量控制与安全信息

本品经 HPLC 检测纯度 ≥96%，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据表明其属于刺激性化学品，操作时应穿戴防护手套、护目镜及防尘口罩。若不慎接触眼睛，需立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地危险化学品管理条例。

（注：实际应用前请务必查阅最新版物质安全数据表 MSDS 并开展风险评估）