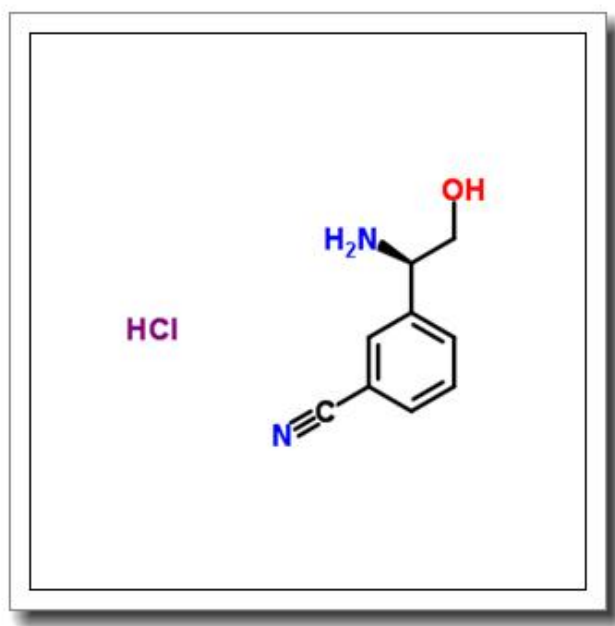


3-[(1R)-1-Amino-2-hydroxyethyl]benzotrile hydrochloride (1:1)

3-[(1R)-1-Amino-2-hydroxyethyl]benzotrile hydrochloride (1:1)



产品基本信息

属性	值
化学名称	3-[(1R)-1-Amino-2-hydroxyethyl]benzotrile hydrochloride (1:1)
中文名称	3-[(1R)-1-Amino-2-hydroxyethyl]benzotrile hydrochloride (1:1)
CAS 号	1245623-77-1
分子式	C ₉ H ₁₁ C ₁ N ₂ O
分子量	198.649
纯度	≥96%

产品说明

3-[(1R)-1-Amino-2-hydroxyethyl]benzotrile hydrochloride (1:1) 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 3-[(1R)-1-氨基-2-羟乙基]苯甲腈盐酸盐 (1:1)，CAS 号 1245623-77-1，分子式 C₉H₁₁C₁N₂O，分子量 198.649。其结构中包含手性中心 (R 构型)、羟基和氨基官能团，赋予其独特的化学性质。纯度 ≥96% (HPLC)，易溶于水、甲醇等极性溶剂，在酸性条件下稳定。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物是 β-肾上腺素能受体激动剂类药物的关键中间体，其手性结构对生物活性具有显著影响。氨基和羟基的存在使其能够参与氢键形成和分子识别，而苯甲腈基团则增强了疏水相互作用。这些特性使其在药物研发中具有重要价值，尤其用于构建具有选择性靶向作用的分子框架。

3. 主要应用领域与具体用途

作为医药中间体，主要用于合成治疗呼吸系统疾病（如哮喘、慢性阻塞性肺病）的支气管扩张剂。在不对称合成中，其手性中心可作为模板诱导立体选择性反应。此外，也用于神经科学领域研究 G 蛋白偶联受体 (GPCR) 的构效关系。

4. 储存条件与使用建议

建议避光密封保存于 2-8℃ 干燥环境中，长期储存需充惰性气体保护。使用时需在干燥环境下操作，避免与强氧化剂接触。溶解建议使用 0.1M 盐酸或磷酸缓冲液 (pH 3-5)，水溶液现配现用。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC、NMR 和质谱进行批次质量控制，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据：急性毒性 (口服，大鼠) LD₅₀ > 2000 mg/kg，皮肤刺激性类别 3。操作时需佩戴防护手套和护目镜，若接触眼睛应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物处理需符合当地化学品管理法规。

(注: 本说明基于现有研究数据, 实际应用前请查阅最新文献并开展小试验证。)