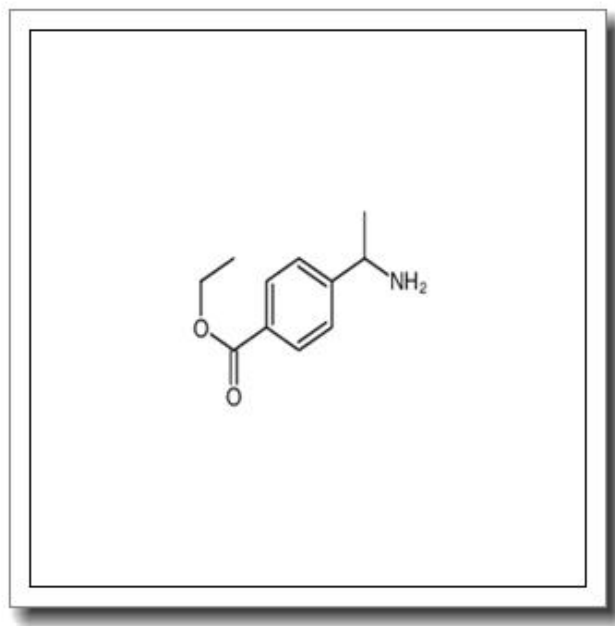


4-(1-氨基乙基)苯甲酸乙酯

ethyl 4-[(1R)-1-aminoethyl]benzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	ethyl 4-[(1R)-1-aminoethyl]benzoate
中文名称	4-(1-氨基乙基)苯甲酸乙酯
CAS 号	802566-87-6
分子式	C ₁₁ H ₁₅ N ₂ O ₂
分子量	193.242
纯度	≥96%

产品说明

4-(1-氨基乙基)苯甲酸乙酯产品说明书

1. 产品概述与化学特性

4-(1-氨基乙基)苯甲酸乙酯 (ethyl 4-[(1R)-1-aminoethyl]benzoate) 是一种手性芳香族化合物，化学式为 $C_{11}H_{15}NO_2$ ，分子量 193.242。其 CAS 号为 802566-87-6，纯度 $\geq 96\%$ 。该化合物由苯甲酸乙酯骨架与 1-氨基乙基侧链构成，具有光学活性 (R 构型)，常温下为白色至类白色结晶或粉末，可溶于有机溶剂如甲醇、乙醇和 DMSO，微溶于水。其结构中的酯基和氨基使其兼具亲脂性与反应活性。

2. 生物化学功能与重要性

作为手性氨基酯类化合物，该产品在生物化学中常用于构建药物中间体或手性催化剂。氨基的碱性特性使其可参与缩合、酰化等反应，而酯基则易于水解或酯交换，为衍生化提供灵活位点。其 R 构型在不对称合成中具有立体选择性价值，尤其在 β -肾上腺素受体激动剂或蛋白酶抑制剂研究中备受关注。

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。在药物合成中，它是制备心血管药物、中枢神经系统调节剂的重要砌块；在材料科学中，可用于合成手性液晶或高分子单体。此外，在酶抑制剂筛选和放射性标记前体合成中亦有潜在用途。

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，避免光照与湿气。开封后需充惰性气体保护以防氧化。使用时应佩戴防护手套和护目镜，在通风橱中操作。溶解推荐使用无水乙醇或 DMF，避免与强酸、强氧化剂直接接触。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 $\geq 96\%$ ，残留溶剂符合 ICH 标准。MSDS 数据显示其具有刺激性，接触皮肤或眼睛需立即用清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物应作为有害化学品处理，遵守当地环保法规。运输分类为非危险品，但需避免与食品混载。

注：以上信息基于现有研究数据，具体应用需进一步实验验证。