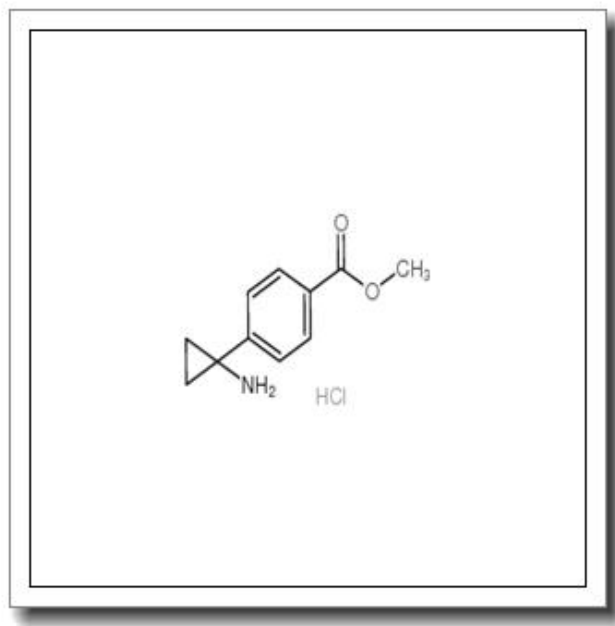


4-(1-氨基环丙基)-苯甲酸甲酯盐酸盐

Benzoic acid, 4-(1-aminocyclopropyl)-, methyl ester, hydrochloride (1:1)



产品基本信息

属性	值
化学名称	Benzoic acid, 4-(1-aminocyclopropyl)-, methyl ester, hydrochloride (1:1)
中文名称	4-(1-氨基环丙基)-苯甲酸甲酯盐酸盐
CAS 号	1014645-87-4
分子式	C11H14ClN02
分子量	227.687
纯度	≥ 96%

产品说明

4-(1-氨基环丙基)-苯甲酸甲酯盐酸盐产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品化学名称为 Benzoic acid, 4-(1-aminocyclopropyl)-, methyl ester, hydrochloride (1:1), 是一种白色至类白色结晶性粉末, 分子式为 $C_{11}H_{14}ClN_2O_2$, 分子量 227.687, CAS 号 1014645-87-4。其结构包含苯甲酸甲酯骨架与 1-氨基环丙基取代基, 以盐酸盐形式稳定存在。纯度 $\geq 96\%$ (HPLC), 易溶于极性有机溶剂 (如甲醇、DMSO), 微溶于水。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为氨基环丙烷衍生物, 具有独特的环张力结构, 可作为生物活性分子合成的关键中间体。其氨基和酯基官能团赋予其参与酰胺化、酯水解等反应的活性, 在药物化学中常用于构建含环丙胺结构的靶向分子, 尤其在激酶抑制剂和神经递质调节剂开发中具有重要价值。

3. 主要应用领域与具体用途

在医药研发领域, 本品主要用于以下方向: 一是作为小分子抗癌药物 (如 PARP 抑制剂) 的合成前体; 二是用于制备中枢神经系统药物 (如 5-HT 受体调节剂) 的中间体。此外, 在农药化学中可用于开发具有环丙烷结构的杀虫剂或杀菌剂。实验室级产品适用于高通量筛选和结构-活性关系 (SAR) 研究。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20°C 干燥避光条件下长期储存, 短期使用可置于 $2-8^{\circ}\text{C}$ 环境。开封后需充氮气保护并密封保存, 避免吸湿分解。使用时应在通风橱中操作, 推荐以无水 DMSO 配制母液 ($10-50\text{ mM}$), 分装后 -80°C 保存备用。避免与强氧化剂或强酸强碱接触。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC、NMR 和质谱验证, 符合药物研发标准。MSDS 显示其属于刺激性化学品 (GHS 分类: Eye Irrit. 2), 操作时需佩戴护目镜、防尘口罩及丁腈手套。

如接触皮肤，立即用大量清水冲洗 15 分钟。废弃物处理需遵循当地危险化学品管理条例。

注：具体实验方案建议参考文献报道的合成与应用方法，或联系技术支持获取定制化解决方案。