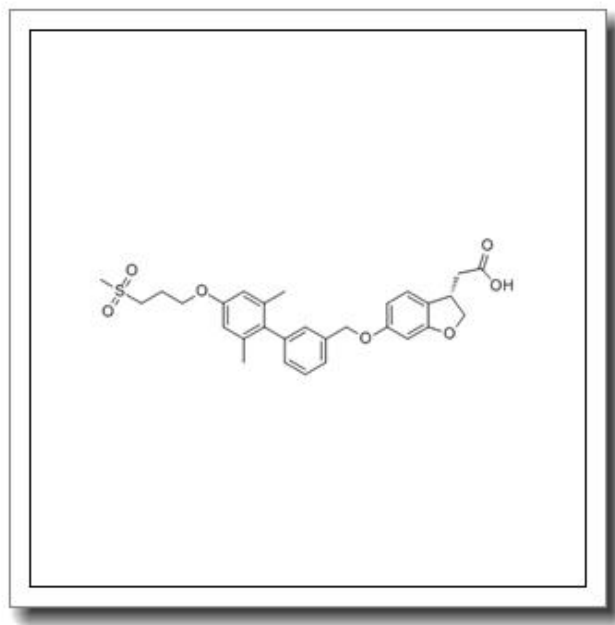


(3S)-6-[[2',6'-二甲基-4'-[3-(甲磺酰基)丙氧基][1,1'-联苯]-3-基]甲氧基]-2,3-二氢-3-苯并呋喃乙酸

2-[(3S)-6-[[3-[2,6-dimethyl-4-(3-methylsulfonylpropoxy)phenyl]phenyl]methoxy]-2,3-dihydro-1-benzofuran-3-yl]acetic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	2-[(3S)-6-[[3-[2,6-dimethyl-4-(3-methylsulfonylpropoxy)phenyl]phenyl]methoxy]-2,3-dihydro-1-benzofuran-3-yl]acetic acid
中文名称	(3S)-6-[[2',6'-二甲基-4'-[3-(甲磺酰基)丙氧基][1,1'-联苯]-3-基]甲氧基]-2,3-二氢-3-苯并呋喃乙酸
CAS 号	1000413-72-8
分子式	C ₂₉ H ₃₂ O ₇ S
分子量	524.625

纯度	$\geq 96\%$
----	-------------

产品说明

2-[(3S)-6-[[3-[2,6-dimethyl-4-(3-methylsulfonylpropoxy)phenyl]phenyl]methoxy]-2,3-dihydro-1-benzofuran-3-yl]acetic acid 产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品是一种高纯度有机化合物，化学名称为(3S)-6-[[2',6'-二甲基-4'-[3-(甲磺酰基)丙氧基][1,1'-联苯]-3-基]甲氧基]-2,3-二氢-3-苯并呋喃乙酸，CAS 号为 1000413-72-8。其分子式为 C₂₉H₃₂O₇S，分子量为 524.625，纯度 ≥96%。该化合物为白色至类白色结晶性粉末，具有特定的立体构型（3S），结构中包含苯并呋喃环、联苯基团及甲磺酰丙氧基等活性基团，赋予其独特的化学性质。

2. 生物化学功能与重要性

作为磺酰基类衍生物，该化合物可通过调控细胞信号通路（如炎症介质或酶活性）发挥生物效应。其分子设计可能针对特定受体或蛋白靶点，例如与前列腺素合成或氧化应激相关的通路。甲磺酰基和苯并呋喃结构的组合增强了其膜渗透性和代谢稳定性，在药物研发中具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品主要用于医药研发领域，尤其作为中间体用于合成抗炎、抗肿瘤或心血管疾病相关的小分子药物。实验室研究中可用于：

- 靶点验证实验中的活性分子筛选
- 结构-活性关系（SAR）研究的核心骨架
- 药物代谢与药代动力学（DMPK）分析的参照标准

4. 储存条件与使用建议

储存于-20℃、避光、干燥的惰性气体环境中，长期保存建议充氩密封。使用前需平衡至室温并避免反复冻融。溶解推荐使用 DMSO 或乙醇（浓度 ≤10 mM），工作液需现配现用。操作时需在通风橱中进行，佩戴防护手套及护目镜。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC、NMR 及质谱进行批次纯度验证，残留溶剂符合 ICH 标准。安全数据：

- 危害标识：H302（吞咽有害）
- 急救措施：接触皮肤后立即用肥皂水冲洗，吸入时转移至新鲜空气环境
- 废弃处理：按危险化学品规范交由专业机构处置

本产品仅限科研用途，不适用于人体或临床诊断。具体实验方案需结合文献优化条件。