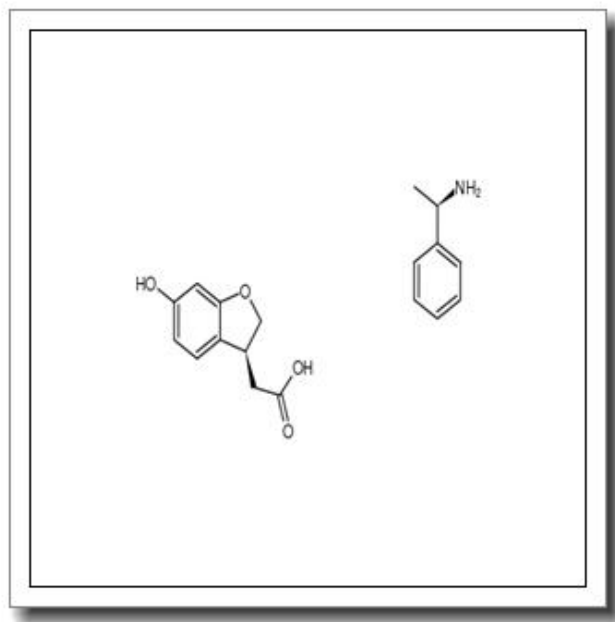


[(3S)-6-hydroxy-2,3-dihydro-1-benzofuran-3-yl]acetic acid (1R)-1-phenylethylamine salt

[(3S)-6-hydroxy-2,3-dihydro-1-benzofuran-3-yl]acetic acid (1R)-1-phenylethylamine salt



产品基本信息

属性	值
化学名称	[(3S)-6-hydroxy-2,3-dihydro-1-benzofuran-3-yl]acetic acid (1R)-1-phenylethylamine salt
中文名称	[(3S)-6-hydroxy-2,3-dihydro-1-benzofuran-3-yl]acetic acid (1R)-1-phenylethylamine salt
CAS 号	1394138-46-5
分子式	C ₁₈ H ₂₁ N ₀₄
分子量	315.364
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

本产品为[(3S)-6-羟基-2,3-二氢-1-苯并呋喃-3-基]乙酸 (1R)-1-苯乙胺盐, 化学名称[(3S)-6-hydroxy-2,3-dihydro-1-benzofuran-3-yl]acetic acid (1R)-1-phenylethylamine salt, CAS 号 1394138-46-5。其分子式为 C₁₈H₂₁N₀₄, 分子量 315.364, 纯度 ≥96%。该化合物为手性有机盐, 包含苯并呋喃骨架与苯乙胺对映体结构, 常温下呈白色至类白色结晶或粉末状, 具有明确的立体构型 (3S, 1R), 需避光保存以维持稳定性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为手性中间体或前体药物, 在生物体系中可能通过苯并呋喃结构参与酶抑制或受体调节。其羟基与羧酸盐结构赋予其潜在的氢键结合能力, 而 (1R)-苯乙胺部分可能影响脂溶性及跨膜转运特性。在不对称合成领域, 该分子可作为构建复杂手性分子的关键模块, 尤其适用于神经活性物质或心血管药物的研发。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发与有机合成领域:

- (1) 药物开发: 作为 α -肾上腺素能受体调节剂或 5-HT 受体配体的合成前体;
- (2) 不对称催化: 用于手性催化剂的设计与优化;
- (3) 生化研究: 探索苯并呋喃衍生物在细胞信号通路中的作用机制。

4. 储存条件与使用建议

储存于 -20°C 至 4°C 的密闭容器中, 避免光照与湿气。开封后建议充氮保护以延长稳定性。使用时需在干燥惰性气体环境下操作 (如手套箱), 溶解性测试显示其易溶于极性有机溶剂 (如 DMSO、甲醇), 水溶性较低。建议实验前进行梯度稀释以验证溶解特性。

5. 质量控制与安全信息

通过 HPLC 检测纯度 ≥96%, 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据:

- (1) 穿戴防护装备 (手套、护目镜) 操作;

- (2) 避免吸入粉尘或接触皮肤，如接触立即用大量清水冲洗；
- (3) 废弃物按危险化学品规范处置。

本产品仅供科研用途，不适用于临床或食品领域。