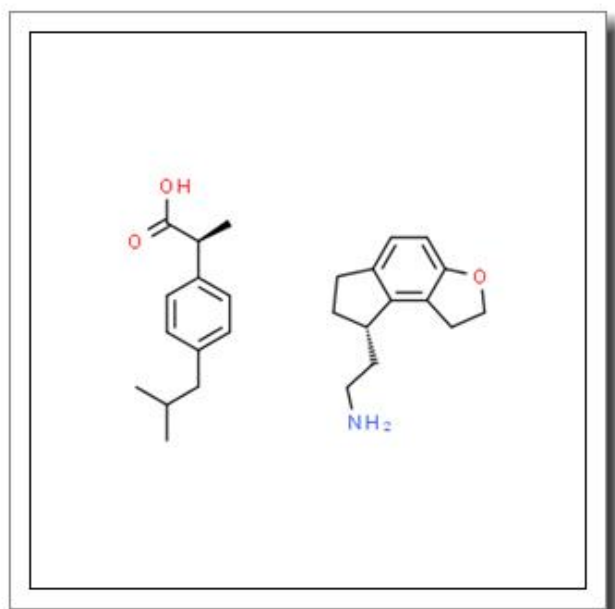


# (S)-2-(1,6,7,8-四氢-2H-茚并[5,4-B]呋喃-8-基)乙-1-胺(S)-2-(4

*Benzeneacetic acid,  $\alpha$ -methyl-4-(2-methylpropyl)-, ( $\alpha$ S)-, compd. with (8S)-1,6,7,8-tetrahydro-2H-indeno[5,4-b]furan-8-ethanamine (1:1)*



## 产品基本信息

属性	值
化学名称	Benzeneacetic acid, $\alpha$ -methyl-4-(2-methylpropyl)-, ( $\alpha$ S)-, compd. with (8S)-1,6,7,8-tetrahydro-2H-indeno[5,4-b]furan-8-ethanamine (1:1)
中文名称	(S)-2-(1,6,7,8-四氢-2H-茚并[5,4-B]呋喃-8-基)乙-1-胺(S)-2-(4
CAS 号	1227056-68-9
分子式	C <sub>26</sub> H <sub>35</sub> N <sub>3</sub> O
分子量	409.561
纯度	≥96%



## 产品说明

### 1. 产品概述与化学特性

本产品为苯乙酸衍生物与茛苳并呋喃乙胺的 1:1 复合物，化学名称为 Benzeneacetic acid,  $\alpha$ -methyl-4-(2-methylpropyl)-, ( $\alpha$  S)-, compd. with (8S)-1,6,7,8-tetrahydro-2H-indeno[5,4-b]furan-8-ethanamine (1:1)，中文名为(S)-2-(1,6,7,8-四氢-2H-茛苳并[5,4-B]呋喃-8-基)乙-1-胺(S)-2-(4。其 CAS 号为 1227056-68-9，分子式为 C<sub>26</sub>H<sub>35</sub>N<sub>3</sub>O<sub>3</sub>，分子量为 409.561，纯度 $\geq$ 96%。该化合物为白色至类白色结晶粉末，具有特定的立体构型 ( $\alpha$  S 和 8S)，在有机溶剂如甲醇、乙醇中具有中等溶解性，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，在药物化学中具有重要价值。其结构中的茛苳并呋喃环和苯乙酸基团可参与受体结合或酶抑制过程，尤其适用于神经递质调节剂或 G 蛋白偶联受体 (GPCR) 靶向药物的研发。高立体选择性 (S 构型) 使其在不对称合成中能显著提高产物的生物活性，降低副产物生成。

### 3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于创新药研发领域，尤其是中枢神经系统 (CNS) 药物和抗炎药物的合成。具体用途包括：

- 作为关键中间体用于合成镇痛或抗抑郁活性分子
- 用于构建多环骨架结构，扩展药物分子库
- 在体外筛选模型中评估其对特定受体的亲和力

### 4. 储存条件与使用建议

储存条件：建议密封保存于-20℃环境下，避免光照与湿气。长期储存需充氮保护以延缓氧化。

使用建议：

- 使用前需恢复至室温并短暂离心

- 推荐在惰性气体（如氩气）环境下操作
- 溶解时优先选择无水 DMSO 或乙醇，避免使用强酸/强碱溶剂

#### 5. 质量控制与安全信息

质量控制：通过 HPLC 验证纯度 $\geq 96\%$ ，手性 HPLC 确认立体构型纯度 $\geq 99\%$ ，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。

安全信息：

- 危害提示：可能引起皮肤刺激（H315）和眼睛损伤（H319）
- 防护措施：操作时佩戴防尘口罩、护目镜及丁腈手套
- 应急处理：接触皮肤后立即用肥皂水冲洗 15 分钟，眼部接触需用生理盐水持续冲洗并就医
- 废弃物处置：按危险化学品规范处理，不可直接排入下水道